

Dissoziation eines H_2 -Moleküls bei Stoß eines H-Atoms

Inaugural-Dissertation zur Erlangung der Doktorwürde
der Naturwissenschaftlichen Fakultät der Philipps-Universität
Marburg an der Lahn

vorgelegt von Munir Safa Aldeen, aus dem Irak

Marburg/Lahn (1968)



DISSOZIATION EINES H_2 -MOLEKÜLS

BEI STÖß EINES H-ATOMS

INAUGURAL - DISSERTATION

zur

Erlangung der Doktorwürde

der

Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Philipps-Universität Marburg/Lahn

vorgelegt von

Munir Safa Aldeen

aus dem

IRAK

Marburg/Lahn (1968)

Zusammenfassung:

Für die Wechselwirkung zwischen H_2 -Molekülen und H-Atomen wird ein Potentialmodell abgeleitet, das die zeitliche Änderung des Radius des Potentialtopfes, während der Annäherung eines H-Atoms zu H_2 -Molekül berücksichtigt. Hiermit wird ein Potentialmodell verbessert, das die zeitliche Änderung des Radius des Potentialtopfes nicht berücksichtigt hat.

Es werden die unelastischen Wirkungsquerschnitte für die Schwingungsanregung und dann Dissoziation von und nach Zuständen mit dem Drehimpuls Null gerechnet.

Die Dissoziation, sowie andere elektronische Anregungen kommen möglicherweise neben der rein elastischen Streuung von H-Atom an H_2 -Molekül.

Die relative Bewegung von drei Protonen und drei Elektronen wird hier klassisch ermittelt.

Um die Koppelung zu vernachlässigen nehmen wir den Fall an, bei dem sich das H-Atom und H_2 -Molekül im Grundzustand befinden; damit wir das Stoßproblem adiabatisch behandeln können. Diese Behandlung wurde schon in anderer Literatur jedoch mit geringer Kenntnis über die Potentialform bei bestimmten Kernkonstellationen und insbesondere über die Frage der Veränderung des H_2 -Potentials durch Annäherung eines H-Atoms durchgeführt.

Diese Veränderung von H_2 -Potential durch die Annäherung eines H-Atoms wird jetzt mit Hilfe der Kurven in der Arbeit von Herrn Dr. Wrzesinsky abgeleitet und für die verbesserte Rechnung von dem Wirkungsquerschnitt der Dissoziation eingeführt und benutzt. Wir diskutieren dann ein quantenmechanisches-drei Körper-Problem mit Rücksicht auf die Randbedingungen und untersuchen den Streuungsquerschnitt (Q). Das intermolekulare Potential auf Grund der relativen Bewegung wird zeitabhängig, gemäß der Bahn des dritten H-Atoms, und verursacht Übergänge, die durch Dirac'sche Störungstheorie gerechnet werden.

Als Ergebnis werden die diskreten Wirkungsquerschnitte sowie die Dissoziation diskutiert.

Der Einfluß der Struktur des Potentialtopfes und des Molekülkontinuums wird untersucht.

Meinem verehrten Lehrer, Herrn Prof. Dr. LUDWIG danke ich sehr für die ständige Förderung dieser Dissertation.

Herrn Prof. Dr. GROSSMANN danke ich für wertvolle Diskussionen.

Herrn Dr. WRZESINSKY danke ich sehr für viele und ständige wertvolle Diskussionen und Anregungen.

I. Allgemeine Kinematik des Problems

H₃-System-Streuung als quantenmechanische Dreikörper-Streuung:

Der Hamilton Operator von 3 H-Atomen wird im Funktionenraum der Zwischenabstände $r_i - r_j$ aller Atome durch:-

$$H^3 = -\sum_{i=1}^3 \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i > j}}^3 \frac{1}{|r_{ij}|} - \sum_{a,b,c} \frac{1}{|r_{ab}|} \Delta_a + \sum_{\substack{a,b,c \\ a > b}} \frac{1}{|r_{ab}|} - \sum_{\substack{i,j,k \\ a,b,c}} \frac{1}{|r_i - r_a|} \quad (1)$$

r_i , ist der Radiusvektor des i-ten Protons, m seine Masse.

$\frac{1}{|r_{ij}|}$ usw. stellt die Wechselwirkung zwischen dem i-ten und j-ten Proton. Diese Wechselwirkung strebt zu Null, wenn die drei H-Atome voneinander weit genug sind.

Der H^3 -Operator stellt einen selbstadjungierten Operator für die quadratisch integrierbare Funktionen von r_i im Hilbertraum dar. Das erste Glied in Gl. (1) entspricht einem Operator mit rein kontinuierlichen Spektrum.

In der stationären Formulierung des Streuungsproblems, ist es erforderlich die Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger Gl.

$$H^3 \psi(r_1, r_2, r_3) = E \psi(r_1, r_2, r_3) \quad - - - - - \quad (2)$$

zu finden, die bestimmte asymptotische Bedingungen im Unendlichen in unserem Konfigurationsraum erfüllen. Diese Bedingungen sind streng formuliert für H₂-System; wo erforderlich ist, für Schröd.

$$\text{Gl. } \hbar^2 \psi(r_{12}, \vec{k}) = \frac{1}{2m} \Delta \psi(r_{12}, \vec{k}) + \frac{1}{r_{12}} \psi(r_{12}, \vec{k}) = \frac{k^2}{2m} \psi(r_{12}, \vec{k}) \quad - - (3)$$

Lösungen von der Form:

$$\psi(r_{12}, \vec{k}) = \exp\{i(\vec{k}, r_{12}) + w(r_{12}, \vec{k})\}$$

zu finden; wo $\vec{k}$ den relativen Impuls der H-Atome spezifiziert, und $w(r_{12}, k)$ die gestreute welle, die asymptotisch für r_{12}

Dieses Problem ist für H₃-System nicht vollkommen formuliert.

Es gibt einen grundlegenden Unterschied zwischen H₃-System und

H₂-System. In dem zweiten bewegen sich beide H-Atome vor und nach dem Stoß frei; sie ändern nur ihre Gänge; und falls-

aus bestimmten Grund- sie sich zu einem H₂-Molekül einigen, dann behalten sie ihren (gebundenen) Molekülzustand. $\hbar^2$ wirkt nur auf $p_{\text{rel.}} = \frac{1}{2}(\hbar - p_2)$.

Diese Einschränkung im Falle H₃-System wird weg. Energie zwischen

zwei H-Atome- wenn sie gebunden sind- und dem dritten Atom kann genommen oder gegeben werden; aber kommt keiner H_3 -Molekül dadurch bzw. durch einen Stoß vor.

Im Falle H_2 -System gibt es so viele Lösungen der Schröd. Gl. wie Eigenfunktionen des ungestörten Hamilton-Operators (ebene Welle), während im Falle H_3 -System sollte es Lösungen mehr als nur ebene Welle auf Grund der Wechselwirkung-Terme.

Also im Falle H_2 -System ändert die Störung den kontinuierlichen Charakter des Energiespektrums nicht; im Falle H_3 -System bringt die Störung (der Wechselwirkung) neue Zweige zum kontinuierlichen Spektrum des ungestörten Operators.

Es ist sehr lästig und schwer, alle mögliche asymptotische Formen der Lösungen von Gl. (3) für $N \rightarrow \infty$ aufzuschreiben. Trotzdem, ist das Problem nicht so entscheidend. Ein vollständiges System von Eigenfunktionen von H^3 kann bestimmt werden, und es kann gezeigt werden, daß eine willkürliche Funktion in ihnen entwickelt werden kann. Man kann dann auch die zeitabhängige Formulierung des Streuungsproblems unseres H_3 bzw. H_2 -H Systems gründen.

II Quasiklassische Betrachtung

1. Vorwort:

In Gl. (1) haben wir den vollständigen Ham. Operator H , bestehend aus der kinetischen Energie der Kerne ($\frac{1}{2m} \sum_{i=1}^3 \Delta_i^2$) und der gesamten potentiellen Energie (einschließlich die Wechselwirkung zwischen den Atomen) bestehend aus der Energie der coulombschen Wechselwirkung der Kerne ($\sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{r_{ij}}$) + die Energie der Elektronen ($-\frac{1}{2} \sum_{a,b,c} \frac{1}{r_{abc}}$) betrachtet,

$$-\sum_{a=1}^3 \frac{1}{r_{a-1}} + \sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{r_{ij}}$$

Nun erwähnen wir, daß für das adiabatische Stoßproblem von $H_2 - H$ der Ham. Operator jetzt die relative Kernbewegung und die Wechselwirkung $V(r,s)$ zutreffet.

Also kann die Kern-Wellenfunktion $\varphi(r,s)$ aus der Schröd.

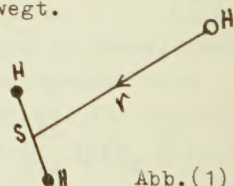
$$\text{Gl.: } \{H_0 + V(r,s)\} \varphi(r,s) = (E_{\text{mol.}} + E_{\text{st.}}) \varphi(r,s) \quad \text{--- (4)}$$

(mit H_0 als ungestörter Ham. Op.)

bei unserem $H_2 - H$ System ist r der Abstand zwischen dem H_2 -Mittelpunkt und dem stoßenden H -Atom, ~~das~~ sich innerhalb des Wechselwirkungspotentials $V(r,s)$ quasi-klassisch bewegt.

$$\leadsto \frac{\int \varphi^* r \varphi dr}{\int \varphi^* \varphi dr} \cong r \text{ der klass. Bahn}$$

außer beim Umkehrpunkt
--- (5)



2. Quasiklassische Näherung:

Bei einigen Fällen der Streuung eines Teilchens, ist die Beschreibung der Bewegung durch die klassische Dynamik eine gute Näherung. Da der Hauptunterschied zwischen der klass.- und quanten Mechanik bei der - Unbestimmtheitsrelation- in der quanten Mechanik liegt, wir können die Bedingungen unter denen die klass. Mechanik eine gute Approximation uns bietet, (nämlich, wenn der Effekt des Unbestimmtheitsprinzips nicht wichtig ist) prüfen.

Es sei $\vec{p}_{\text{st}}$ der Anfangsimpuls des stoßenden H -Atoms,
 α der Streuwinkel.

Für die klass. Beschreibung soll:

$$1. \Delta p_{st} / p_{st} \ll \nu$$

wobei Δp_{st} die Unbestimmtheit im zu p_{st} senkrechten Impuls.

$$2. \Delta B \approx \hbar / \Delta p_{st} \ll B \leadsto \hbar \Delta p_{st} / p_{st} \Delta p_{st} \ll \nu B \\ \leadsto B p_{st} \nu \gg 1 \quad \text{--- (6)}$$

d.h. wenn das Potential $V(r, s)$ sehr schnell mit r abnimmt, derart, daß ν mit zunehmendem Stoßparameter B schneller als $\frac{1}{B}$ (für bestimmten p_{st}) abnimmt, dann gilt die klass. Beschreibung nicht.

Es sei die Bedingung (6) erfüllt, und $\nu \neq 0$, dann haben wir, aus der Entwicklung von δ -Funktion: $\delta(\cos \nu - 1) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \nu)$ die Beziehung $0 = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \nu)$

Im Sinne des Korrespondenzprinzips, wonach im Limus von großer quanten Zahl, die quanten Mechanik in die klass. Mechanik übergeht, nehmen wir die asymptotische Form für groß $l = B p_{st}$ $P_l(\cos \nu) \rightarrow \sqrt{2/\pi l \sin \nu} \sin [l \nu + \pi/4] \{ 1 - (1/8 l \nu) \cos 2 \nu + [l(l+1/2) \nu + \pi/4]^2 \}$

Nach Benützen von (6) und $P_l(\cos \nu)$, in der Formel:

$$f(\nu) = \frac{1}{2i\hbar} \sum_l (2l+1) [e^{i\delta_l} - 1] P_l(\cos \nu), \\ \frac{l}{\text{grös}} f(\nu) \rightarrow \frac{1}{2k} \sum_l \sqrt{\frac{2l}{\pi \sin \nu}} e^{2i\delta_l - i(l(l+1/2)\nu - \pi/4)} - e^{i(l(l+1/2)\nu + \pi/4)}$$

Die Exponentialfunktion (als Funktionen von $l = B p_{st}$) oszillieren schnell, also tragen nur jene l für die: --- (7)

$$2d\delta_l/dl \pm \nu = 0$$

oder $\delta = \pm \frac{1}{2} l \nu$ bei. --- (8)

Aus (6) und (8) folgt für die klass. Näherung zu gelten daß die Phasenverschiebung $|\delta|$ nicht klein sein darf.

Es ist bekannt, daß die J. W. K. B. Methode für Schröd. Gl. zu lösen, und eine Lösung in dem klass. Limus gibt. Aus der Formel: $\delta_l = \lim_{r \rightarrow \infty} \left[\int_{r_0}^r p_{st} dr - \int_{r_0}^r \sqrt{k^2 - (l+1/2)^2/r^2} dr \right] \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Born. Näherung;} \\ p_{st}^2 = 2\mu_{red} E_{st}; \hbar=1 \end{array} \right.$ $\leadsto \delta_l = \int_{r_0}^{\infty} \left[\sqrt{k^2 - 2\mu_{red} V(r, s = \text{konst}) - (B p_{st}/r)^2} - k \right] dr - k r_0 + \frac{B \pi p_{st}}{2}$

und nach (8):

$$\nu = \pi - 2 \int_{r_0}^{\infty} B p_{st} dr / \sqrt{2\mu_{red} (E_{st} - V(r) - (B p_{st}/r)^2)} r^2 \quad \text{--- (9)}$$

Dies ist die klass. Formel selbst. Deshalb wenn (6) und (7) erfüllt sind, dann ist die klass. Beschreibung für H_2 -H Streuung eine gute Näherung.

Aus (9), für den Fall $\nu \approx 0$, folgt, ^{daß} einer der beiden B oder p_{st} , oder beide groß sein muß, damit die Streuung klass. gerechnet werden kann. Es wird dieser Fall ($\nu=0$) betrachtet; d. h. die Radialbewegung des dritten H-Atoms.

Kleiner ν gleich (in der Größenordnung) zu Kraft $U(B)$ die an das stoßenden H-Atom von Abstand B x Stoßzeit $\frac{B}{v} \times \frac{1}{v_{rad}}$:

$$\nu \sim |U(B)|B / \mu_{red} \cdot v^{-2}$$

Daraus können wir (6) für kleiner ν , als:

$$U(B) B^2 \gg v.$$

Das ist auch bei unserer H_2 -H Streuung erfüllt:

Zum Beispiel setzen wir voraus $B^2 = 2^2$ (atomare Einheit),

für: potentielle Energie = 4 e.V.; dann erhalten wir $U(B) = 1/12$

$$(U(B) \equiv \text{pot. Energie} / \text{Stoßparameter} = \frac{4/27 \cdot 2^1}{2} \approx \frac{1}{12} [a.E])$$

und $v = 129/\sqrt{E_{st}} = 65$ (atomare Einheit)

$$\leadsto 1/3 \gg 1/65$$

Aus (10) folgt: wenn $V(r)$ schneller als $1/r$ abnimmt, dann soll B genug groß sein. Nach (9) verlangen wir, daß ν nicht zu klein ist.

Wenn nun $V(r)$ langsamer als $1/r$ abnimmt, dann braucht B nicht unbedingt groß zu sein; $\leadsto$ Streuung durch kleine Werte von ν ist bei diesem $V(r)$ klassisch, aber das verbietet nicht, daß ν groß sein kann; und das hängt von der Form von $V(r)$ bzw. von seinem konstanten Faktor (α) ab; wie es bei unserem $V(r)$ der Fall ist, wo (α) groß ist. $V(r)$ für unseres Problem, wie wir später sehen werden, sieht folgendes aus:

$$V(r) = \alpha / (b + r^2), \quad \alpha = 27, \quad b = 1.$$

a) Approximation des exakten H_2 -H Potentials:

Um das exakte Potential zu approximieren, ist die Singulett Kurve $^1\Sigma$ für große Werte r , und die Triplett Kurve $^3\Sigma$ für kleine Werte r zu nehmen; für mittlere Werte r wo $r \approx 3.5 a_0/2$ kommt Übergang vor so, daß die Wellenfunktion für den Triplett-Zustand $\psi_{^3\Sigma}$ die Rolle des Singulett-Zustandes $\psi_{^1\Sigma}$ übernimmt.

In dieser (Symmetrie-) Lage berühren sich die beiden tiefsten Potentialflächen. In diesem eindimensionalen Unterraum ($s, r_{\text{sym}}, \beta = \pi/2$), bzw. für diese Kernkonfiguration ist $V_1(s) = V_2(s)$ wobei s , der Abstand zwischen den beiden Protonen vom H_2 -Mol. ist. $V_1(s)$ ist stets eine Kurve mit steilem Anstieg zu positiven Energien für s mit einem Minimum bei $s_0 = 1.4$; $V_2(s)$ ist stets eine abstoßende Kurve, die jedoch in der Stärke der Abstoßung mit sinkenden r zunächst abnimmt.

Nach KROESSE, u. JAMESON, läßt sich im wichtigen Bereich kleiner Abstände, $V(r, s)$ näherungsweise folgendes wiedergeben:

$$V(r, s) = -V_0(1 - a \times \exp.(-br))K(s)$$

mit $K(s) = 1$ für s kleiner als R_0 ; $K(s) = 0$ für s größer als R_0 .

R ist der Radius des Potentialkastens

V_0 ist die Tiefe " "

$a = 0.3$, $b = 1.3$

Nach dieser Formel, -und für das Potential des gleichseitigen Dreiecks als Funktion der Seitenlänge s , wo $V_1(s) = V_2(s)$ - ist

$$V(r, s) \approx 0.5 \text{ für } r = 1.75 [a_0]$$

während nach unserem H_2 -H Pot. (dieser Formel im Kap. (VI) S. 31 steht), nämlich nach $V(r, s) = -4.76 + \frac{26.5}{1+r^2}$, ist bei $V(r, s) = .5$, $\rightarrow r = 2 [a_0]$ ist. Der Wert (5 eV) ist als mittleren Wert für die Werte $V_1 = V_2 = -1$, u. $-.13$ eV nach Boys, Shavitt; u. Hirschfelder.

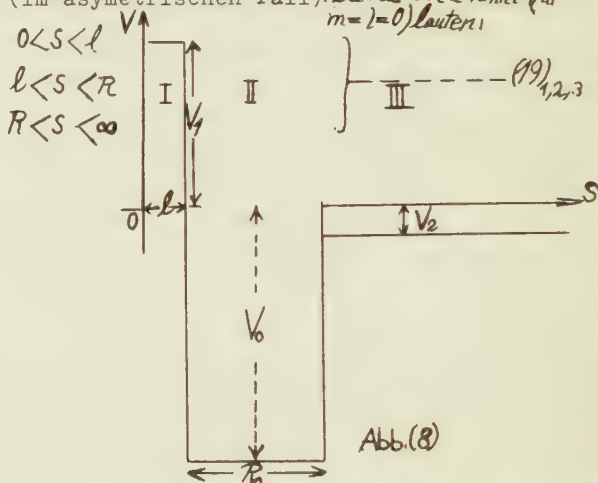
IV Die Wellenfunktionen im Potentialtopf

1. Der Potentialtopf (im asymmetrischen Fall): Die rad. Well.funkt. für $m=1=0$ lauten:

$$\frac{1}{2\mu} \psi'' + (E - V_1) \psi = 0 \quad 0 < s < l$$

$$\frac{1}{2\mu} \psi'' + (E - V_0) \psi = 0 \quad l < s < R$$

$$\frac{1}{2\mu} \psi'' + (E - V_2) \psi = 0 \quad R < s < \infty$$



wegen dieser Komplikation setzen wir $V_2 = (V_0 - V_1)/2 = \text{konst.}$. Außerdem führen wir nun α, β u. γ durch die Bezeichnung ein:

$$\begin{aligned} \alpha &= \sqrt{2\mu(V_1 - E)} \\ \beta &= \sqrt{2\mu(V_0 + E)} = k \\ \gamma &= \sqrt{2\mu(V_2 + E)} \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} \text{reell} \\ " \\ " \end{array} \right\} \quad \text{--- (20)}$$

$$\begin{aligned} \psi_I &= a_1 e^{-\alpha s} + a_2 e^{\alpha s} \\ \psi_{II} &= b_1 e^{-i k s} + b_2 e^{i k s} \\ \psi_{III} &= c_1 e^{-\gamma s} + c_2 e^{\gamma s} \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} \quad \text{--- (21)}$$

In (8), erhalten wir wegen

$$\psi_I = 0, \text{ für } s=0 \quad \leadsto a_1 = -a_2, \quad \leadsto$$

auch im Bereich II können wir ψ_{II} folgendes schreiben:

$$\psi_{II} = b \sin(k s + \delta)$$

Im Bereich III setzt man $c_2 = 0$ ein, da sonst $\psi \rightarrow \infty$, für $s \rightarrow \infty$.

$$\psi_I = \alpha (e^{\alpha s} - e^{-\alpha s}), \quad \psi_{II} = b \sin(k s + \delta); \quad \psi_{III} = c_1 e^{-\gamma s} \quad \text{--- (22)}$$

Als ψ und ψ' , daß sie am Rande des Topfes stetig sind, erhalten wir:

$$\begin{aligned} \psi_I / \psi_{II} \Big|_{s=l} &= \psi_{II} / \psi_{III} \Big|_{s=R} \quad \leadsto \quad \alpha = k \cot(\kappa l + \delta) \\ \psi_I' / \psi_{II}' \Big|_{s=l} &= \psi_{II}' / \psi_{III}' \Big|_{s=R+l} \quad \leadsto \quad \gamma = k \cot(\kappa R_0 + \kappa l + \delta) \end{aligned}$$

$$\text{mit } \alpha = \{2\mu(V_1 - E)\}^{1/2} \quad \text{u. } \gamma = \{2\mu(|V_2| + E)\}^{1/2}$$

$$\rightarrow \sqrt{2\mu(V_0 + V_1)/\hbar^2} - 1 = \text{ctg}(\kappa l + \delta)$$

$$-\sqrt{2\mu(V_0 - V_2)/k^2} - 1 = \text{ctg}(kR_0 + kl + \delta)$$

$\downarrow = R_m$

Da $\operatorname{ctg}(x)$ periodisch mit der Periode π ist, können wir folgendes schreiben:

Schreiben:

$$\delta + kl = \arcsin \left\{ k / \sqrt{2\mu(V_0 + V_1)} \right\} + n_1 \pi$$

$$kR_0 + \delta + kl = -\arcsin\left\{k/\sqrt{2\mu(V_0 - V_2)}\right\} + n_2\pi$$

$$\gamma k R_0 = n\pi - \arcsin\left\{k/\sqrt{2\mu(V_0 - V_2)}\right\} - \arcsin\left\{k/\sqrt{2\mu(V_0 + V_1)}\right\} \dots (23)$$

Um die Gl. (23) existierende Wurzeln zu haben, muß die rechte Seite für $k = \{2\mu(V_0 - V_2)\}^{1/2}$ kleiner als die linke Seite sein (da das Argument von $\arcsin$ (in Maximum) = 1 ist, und daher liegen die Werte von k zwischen Null und $\{2\mu(V_0 - V_2)\}^{1/2}$).

Verhalten wir folgende Ungleichung: (mit $n = 15$ für unseren H_2 -Mol.)

$$R_0 \{2\mu(V_0 - V_2)\}^{1/2} \geq 15\pi - \frac{\pi}{2} - \arcsin\left\{\sqrt{(V_0 - V_2)/(V_0 + V_1)}\right\} \quad (24)$$

Und für $(V_0 - V_2)/(V_0 + V_1) \approx 1/2$

$$\rightarrow R_{0, \text{asym}} \geq 14.25 / \sqrt{2\mu(V_0 - V_2)} \quad (\text{für asymm. Topf.})$$

→ Für einen symmetrischen Topf (d.h. $V_1 = V_2 = 0$): $R_{q, \text{sym}} \geq \frac{14\pi}{\sqrt{2\mu_0}}$

und da $\frac{14 \cdot 25}{\sqrt{2 \mu (V_0 + V_2)}} > \frac{14 \pi}{\sqrt{2 \mu V_0}}$

$\rightarrow R_{\text{asym}} > R_{\text{sym}}$ auch allgemein sogar $R_{\text{asym}} > R_{\text{sym}}$ -- (25)

Für diesen symmetrischen Topf reduziert sich Gl. (23) zu:

$$(-k_n R_0 + 15\pi)/2 = \arcsin(k_n \sqrt{2\mu_0})$$

Setzen wir: $\frac{1}{2} R_0 = \gamma_n$ (mit $\bar{\omega}_1 \equiv \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{\mu}{V_0}} \rightarrow$ od. $\omega_1 = \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{\mu}{V_0}} \equiv \bar{\omega}_1 \cdot 2$)
so erhalten wir für ungerade n:

$$\cos \eta = \mp \eta \omega, \quad \omega = \mp \eta \cdot 2/\omega \quad \text{--- (26)}$$

$$\text{bzw. } |\cos k_n R_0| = k_n R_0 / \omega \quad \text{--- ungerade } n \quad \text{--- (26)}$$

Die Wurzeln der Gl. (20) müssen die Bedingung erfüllen, daß für gerade n (d.h. die Terme II, IV, VI usw. bis XIV vom diskreten Spektrum für H_2 -mol.) erhalten wir die Eigenwertgleichung:

$$\sin \eta_n = \mp \eta_n \omega \quad \text{bzw.} \quad |\sin k_n R_0| = k_n R_0 / \omega \quad \text{--- (27)}$$

wobei wir jene Wurzel nehmen, für die $\eta_n < 0$ ist.

2. Der Potentialtopf und deren Wellenfunktionen (im symmetrischen Fall)

Aus der Ungl. (24) ersinnen wir, daß die kleine Strecke l im Bereich I (mit R_0 und somit mit V_0 als zwei Parameter des Potentialtopfes) keine Rolle gespielt hat (solange V_1 außerhalb des Topfes endlich ist)

Diese Strecke l wird -außerdem- für einen (symmetrischen) Harmonischen-Oszillator noch kleiner als im Falle eines asymmetrischen Harmonischen-Oszillator, wie man aus der Abb. (10), das sieht.

wir betrachten deshalb der Einfachheit halber einen symmetrischen Topf, der links mit $s = 0$

rechts mit $s = R$

V_0 (Tiefe des Topfes) = 4.76 (e.V.)

und der Radius des Topfes $k = 2.01$

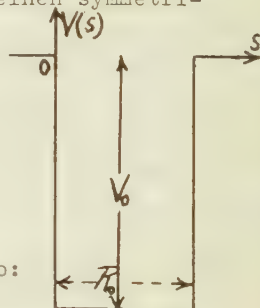


Abb. (9)

Wir haben zwei verschiedene Gebiete, nämlich wo:

1. $0 \leq s \leq R_0$

2. $s > R_0$

sowohl für diskretes Spektrum als auch kontinuierliches Spektrum:

1. Für diskretes Spektrum:

aus Gl. (22) für $s = 0$, bekommen wir:

$$\psi_{II}(0) = 0 \quad \leadsto \quad \delta = 0$$

$$\leadsto \psi(s) = b_n \sin(k_n s)$$

$$\psi(s) = c_n e^{-k_n s}$$

$$\left. \begin{array}{l} s < R_0 \\ s > R_0 \end{array} \right\} \text{--- (28)}$$

wobei $k_n \text{ (mit } V_2=0) = \sqrt{2\mu |E_n|}$

μ ist die reduzierte Masse
des H_2 -Moleküls.

$$k_n \text{ (} E_n < 0 \text{)} = 2\mu (V_0 + E_n)$$

2. Für kontinuierliches Spektrum:

$$\psi_p(s) = b_p \sin k_p s$$

$$\psi_p'(s) = c_p \sin(K_p s + \delta_p)$$

wobei $K_p = \sqrt{2\mu E_p}$

$$\left. \begin{array}{l} s < R_0 \\ s > R_0 \end{array} \right\} \text{--- (29)}$$

Aus der Normierungs- und Randbedingung erhält man (wie auch bei der Arbeit von Prof. Großmann ist): $\leadsto$

$$b_n = \left\{ 2 r_n / (1 + r_n R_0) \right\}^{1/2}$$

$$c_n = b_n \sin(k_n R_0) e^{i k_n R_0}$$

V Herleitung der relativen Bewegungsgleichung

Es wird zuerst die Diff. gl. und ihre Lös. als Bewegungsgl. der relativen Bewegung eines H-Atoms mit der relativen Masse $\mu_{\text{red}} = 2m/3$, innerhalb eines reinen zentralen Pot. $V(r) = V(r_1, r_2) - V_0(\text{des } H_2)$, und mit $E_{\text{st}} = \frac{\mu_{\text{red}}}{2} \dot{r}^2$ hergeleitet.

1. Lagrange'sche Funktion unserer H_2-H Bewegung:

$$L = T - V = \frac{1}{2} \mu_{\text{red}} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) - V(r)$$

$$\text{mit } p_{\theta} = \partial L / \partial \dot{\theta} = \mu_{\text{red}} r^2 \dot{\theta}$$

$$\dot{p}_{\theta} = \frac{d}{dt} (\mu_{\text{red}} r^2 \dot{\theta}) = 0$$

$$\rightarrow \mu_{\text{red}} r^2 \dot{\theta} = l$$

(konstanter Betrag des Drehimpulses)

Die übrige Lagr. Gl. für r ist

$$d(\mu_{\text{red}} r \dot{r}) / dt - \mu_{\text{red}} r \dot{\theta}^2 + \partial V(r) / \partial r = 0$$

$$\text{d.h. } \mu_{\text{red}} \ddot{r} - \mu_{\text{red}} r \dot{\theta}^2 + \partial V(r) / \partial r = 0 \quad \text{----- (30)}$$

$$\text{Aus: } l = \mu_{\text{red}} r^2 \dot{\theta} \rightarrow \dot{\theta}^2 = l^2 / \mu_{\text{red}} r^4$$

$$\text{und in (30) eingesetzt} \rightarrow \mu_{\text{red}} \ddot{r} - l^2 / \mu_{\text{red}} r^3 = - \partial V / \partial r$$

Außerdem gibt es, hinsichtlich der totalen Energie- da die Kräfte konservativ sind- die folgende Lösung der Gleichung der Bewegung:

$$E_{\text{st}} = \frac{1}{2 \mu_{\text{red}}} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) + V(r)$$

Gl. (30) kann wie folgt umgeschrieben werden:

$$\mu_{\text{red}} \ddot{r} = - \partial (V(r) + \frac{1}{2} \frac{l^2}{\mu_{\text{red}} r^2}) / \partial r \quad ; \quad \text{oder äquivalent:}$$

$$d(\mu_{\text{red}} \dot{r}^2 / 2) / dt = - d(V(r) + \frac{1}{2} \frac{l^2}{\mu_{\text{red}} r^2}) / dt$$

$$\rightarrow \frac{d}{dt} (\mu_{\text{red}} \dot{r}^2 / 2) = E_{\text{st}} - V(r) - l^2 / 2 \mu_{\text{red}} r^2 \quad \text{----- (31)}$$

$$\rightarrow \dot{r} = \sqrt{2 \mu_{\text{red}} (E_{\text{st}} - V(r) - l^2 / 2 \mu_{\text{red}} r^2)} \quad \text{----- (32)}$$

Unser drittes (stoßendes) H-Atom bewegt sich im Potential:

$$V(r) = V(r, s = 1.4) - V(\text{des H}_2\text{-Mol.}) \\ = V(r, s = 1.4) - V_0 = V(r) - V_0 - (-V_0) = V(r)$$

Dieses $V(r)$ sieht bei uns (und mit Hilfe der Kurven von Herrn Dr. wrzesinsky) folgendes aus, wie wir später das ausführlicher sehen werden:

$$V(r) = \alpha / (1 + r^2(t))$$

$$\text{und } l = \mu_{\text{red}} v \cdot B, \quad E_{\text{st}} = \frac{1}{2} \mu_{\text{red}} v^2$$

$$dr = dt v \left\{ 1 - B^2/r^2 - \alpha/E_{\text{st}}(1+r^2) \right\}^{1/2} \quad \text{--- (33)}$$

$$\leadsto t = \tilde{r}_0^{-1} \int_{r_0}^r \left\{ 1 - B^2/r^2 - \alpha/E_{\text{st}}(1+r^2) \right\}^{-1/2} dr \quad \text{--- (34)}$$

mit den Randbedingungen: $r(-t) = r(t)$; und $r(t=0) = r_0$.

Aus der Abb. (10), und $E_{\text{st}} = V(r(t=0)) + l^2 / (2 \mu_{\text{red}} r^2(t=0))$ d.h. Gl(31) mit $\dot{r}_0 = 0$:

$$\leadsto 1 = \frac{B^2}{r_0^2} + \alpha_0 / (1 + r_0^2) \quad \leftarrow \alpha_0 = \alpha / E_{\text{st}} \quad \leadsto E_{\text{st}} = \alpha / (1 + r_0^2) \quad \text{für } B=0 \quad \text{--- (35)}$$

d.h. damit das stoßende H-Atom bis zum H_2 -Mittelpunkt hinein

dringt, muß $E_{\text{st}} = \alpha$ (in Elektron-Volt) $= \frac{\alpha}{27.21}$ (atomare Einheit)

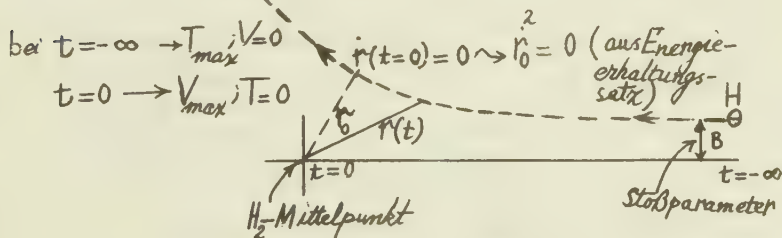
Sonst ist r_0 immer größer als B :

$$B = +r_0 \sqrt{1 - \alpha/E_{\text{st}}(1+r_0^2)} \quad \text{--- (35)'}$$

d.h. für & sehr große E_{st} nähert sich B viel von r_0

Auch für: $B \gg 1 [a_0]$, $[a_0] = 5.29 \times 10^{-8} \text{ cm}$ $\rightarrow B \approx r_0$

und auch für: B und $E_{\text{st}} \gg 1 [a_0]$ $\rightarrow B \approx r_0$



Abb(10)

2. Lösung der Differentialgleichung (33) der relativen Bewegung:

Wir setzen $f(r) = B^2/r^2 + \frac{\alpha_0}{1+r^2}$ ———— (36)

$\rightarrow \dot{r} = v \sqrt{1 - f(r)}$, und nachdem wir $f(r)$ in eine Tayloreihe entwickeln erhalten wir:

$$\dot{r} = v \left\{ 1 - f(r_0) - (r-r_0) f'(r_0) - \frac{(r-r_0)^2}{2} f''(r_0) - \dots \right\}^{1/2}; \quad \left. \frac{f(r)}{r=r_0} \right| = f'(r_0) \text{ bei unserem Fall.}$$

$$= v \left\{ \left(\frac{2B^2}{r_0^2} - \frac{2\alpha_0 r_0^2}{(1+r_0^2)^2} - \frac{3B^2}{r_0^2} - \frac{3\alpha_0 r_0^4 - \alpha r_0^2}{(1+r_0^2)^3} - \dots \right) \right.$$

$$\left. - r \left(\frac{2B^2}{r_0^3} + \frac{2\alpha_0 r_0^2}{(1+r_0^2)^2} + \frac{6B^2}{r_0^3} + \frac{6\alpha_0 r_0^3 - 2\alpha_0 r_0}{(1+r_0^2)^3} - \dots \right) \right.$$

$$\left. - r^2 \left(\frac{3B^2}{r_0^4} + \frac{3\alpha_0 r_0^2 - \alpha_0}{(1+r_0^2)^3} - \dots \right) \right\}^{1/2} \quad \text{--- (37)}$$

$$\rightarrow \dot{r}^2 = v^2 (-a + br - cr^2) \quad \text{--- (38)}$$

$$\left. \begin{aligned} \text{wobei: } a &= 5B^2/r_0^2 + 2\alpha_0 r_0^2 (1+r_0^2)^{-2} + \alpha_0 r_0^2 (3r_0^2 - 1)(1+r_0^2)^{-3} \\ b &= 8B^2/r_0^3 + 2\alpha_0 r_0 (1+r_0^2)^{-2} - 2\alpha_0 r_0 (3r_0^2 - 1)(1+r_0^2)^{-3} \\ c &= 3B^2/r_0^4 + \alpha_0 (3r_0^2 - 1)(1+r_0^2)^{-3} \end{aligned} \right\} \quad \text{--- (39)}$$

Wir differenzieren (38) nach t :

$$2\dot{r}\ddot{r} = v^2 b \dot{r} - 2v^2 c r \dot{r} \quad (\text{mit } \dot{r} \neq 0)$$

$$\rightarrow 2\ddot{r} = v^2 b - 2v^2 c r, \text{ oder } \ddot{r} = \frac{v^2 b/2 - v^2 c r(t)}{= g(t)} \quad \text{--- (40)}$$

so erhalten wir nach zweimaliger Differentiation nach t :

$$0 - v^2 c \dot{r} = \dot{g}; \text{ und dann nach } t \text{ differenziert:}$$

$$-v^2 c \ddot{r} = \ddot{g} \quad \rightarrow \ddot{r} = -\ddot{g}/v^2 c$$

und zusammen mit (40): $\rightarrow \ddot{g}/v^2 c = -g$ oder $\ddot{g} + \lambda g = 0$; $\lambda = v^2 c > 0$

$$\rightarrow g = C_1 \cos \sqrt{\lambda} t + C_2 \sin \sqrt{\lambda} t \quad \text{--- (41)}$$

$$\rightarrow r(t) = -C_1 \cos \sqrt{\lambda} t - C_2 \sin \sqrt{\lambda} t + b/2c \quad \text{--- (42)}$$

$$\text{mit } C_1 = C_1 \lambda^{-1}, \quad C_2 = C_2 \lambda^{-1}$$

Für $t = 0$ haben wir:

$$r_0 = -c_1 + b/2c$$

$$\text{d.h. } c_1 = -r_0 + b/2c$$

$$\text{Für } \dot{r}|_{t=0} (= \dot{r}_0) = 0 \cdot c_1' + 0 - 1 \cdot c_2' \quad , \quad \text{mit } c_1' = \sqrt{\lambda} c_1, \quad c_2' = \sqrt{\lambda} c_2$$

$$\leadsto c_2' = \dot{r}|_{t=0} = 0 \quad \leftarrow \text{das kann man aus Gl. (38) u. (38); und auch aus dem Energie-Erhaltungssatz (Abb. (10)).}$$

$$\leadsto r(t) = \left(r_0 - \frac{b}{2c}\right) \cos \sqrt{\lambda} t + \frac{b}{2c}$$

$$= r_0 - (r_0 \lambda / 2) t^2 - \frac{b'}{2c} + \frac{b}{2c} \frac{\lambda}{2} t^2 + \frac{b'}{2c} = r_0 + \left(\frac{v^2 b}{2} - r_0 v^2 c\right) \frac{t^2}{2}$$

$$\leadsto r(t) = r_0 + \frac{t^2}{2} (b \lambda / 2c - r_0 \lambda) \quad \beta = 2$$

$$r(t) = r_0 + \frac{\beta}{2} t^2 \quad \text{--- (43)}$$

wobei β eine konstante Beschleunigung (hinsichtlich der Zeit) ist: $\beta = b v^2 / 2 - r_0 c v^2$,

und nach Einsetzen von b und c aus (39) in β erhalten wir für t von 0 bis unendlich:

$$\beta = \frac{v^2}{r_0} \left(B^2 r_0^2 + \alpha_0 r_0^2 / (1 + r_0^2) \right) \quad , \quad \text{mit } \alpha_0 = \alpha / E_{st} \quad \text{--- (44)}$$

$$\text{Für } \alpha \cong 27 \quad \text{ist } E_{st} \text{ in (e.V.) zu setzen.}$$

$$\alpha \cong 1 \quad \text{ist } E_{st} \text{ in (a.E.) zu setzen.}$$

3. $V(t)$ - als Funktion der Zeit:

$V(r)$ ist das H-Atom-Potential, wie das auf Seite (20, u. 21) kurz erwähnt ist.

Aus $V(r) = \alpha / (1 + r^2)$ und Gl. (43) für $r(t)$ erhalten wir:

$$V(r(t)) = \alpha / \left(1 + \left(r_0 + \beta t^2 / 2 \right)^2 \right)$$

$$\leadsto V(t) = \frac{4 \alpha / \beta^2}{\alpha_1 + \beta_1 t^2 + t^4} \quad \text{--- (45)}$$

$$\text{mit } \alpha_1 = 4(1 + r_0^2) / \beta^2 \quad ; \quad \beta_1 = 4 r_0 / \beta$$

3. Vereinfachung der Beziehung (44):

Diese Vereinfachung werden wir nachher z.B. für Erleichterung der Integrationen bei den Berechnung d. Streuungsschritte benutzen:

Aus der Formel (44) für die Beschleunigung β nämlich,

$$\beta = v^2 (\beta^2 / r_0^3 + \alpha_0 r_0 / (1 + r_0^2)^2)$$

und der Gl. (36)

ordnen wir für verschiedene Werte

von r_0 und E_{st} eine Tabelle worin

β/v^2 sich befinden.

Aus der Tabelle, und abgesehen von

den (praktisch) unwichtigen Daten

für Teil (a) und (b), finden wir,

daß die Werte von β/v^2 zwischen $1/2$ und $1/4$ liegen:

$$\beta/v^2 \approx_{\text{gem.}} 0.40$$

$$\rightarrow \beta \approx_{\text{gem.}} 0.40 v^2 \quad \text{----- (44)}_1$$

das gilt, wie man aus der Tabelle

ersieht, gerade für

$r_0 = 2$; $\alpha_0 = 5$, d.h. $E_{st} = 5.32$

und B ungefähr gleich Null;

und das gilt aber auch für Werte

von B, die nicht viel größer als

Null.

Die Formel (44)₁ gilt auch für die

Werte von r_0 , die größer und die

kleiner als 2, aber nicht

$\alpha_0 \leq 2$, wobei wir wieder den Wert

(ungefähr) 0.40 erhalten.

Für unsere (weitere) Berechnung

werden wir folgende (für den

wichtigen Bereich von r_0 und E_{st})

genauere Formel:

$$\beta = 0.6 v^2 \sqrt{r_0} \quad \text{----- (44)}_2$$

Tabelle (4)

r_0	α_0	B	β/v^2
(a) 1/2	1	.2236	≈ 1
	2	imag.	
	3	"	
	...		
(b) 1	1	.707	.75
	2	0	.5
	3	imag.	
	...	"	
2	1	1.79	.48
	2	1.549	.46
	3	1.265	.44
	4	.895	.42
	5	0	.40
	6	imag.	
3	1	2.85	.33
	2	2.68	.326
	3	2.51	.323
	4	2.324	.32
	5	2.12	.316
4	1	3.88	.2490
	2	3.76	.2486
	3	3.63	.2474
	4	3.50	.2464
	5	3.36	.2460
7.3	1	7.032	.1296
	...		
	52	2.79	.1312
	56	0	.1325
10	...	≈ 10	
	...		
	50	7.	$\approx .1$
	60	6.32	$\approx .1$

$\approx$ bißchen weniger

Für große Werte r_0 bzw. bei dem Bereich sehr kleiner Stoßenergien (E_{st} kleiner als 1) erhalten wir fast unabhängig von B und E_{st} -wie man in der Tabelle ersieht- folgende Beziehung:

$$\beta = .13 v^2 \quad (\text{bei } r_0 \approx 7.3, \text{ gilt diese Beziehung}$$

und noch genauer (mit der r_0 -Abhängigkeit):

$$\beta = .37 v^2 / \sqrt{r_0}$$

Für sehr kleine Abstände bzw. große E_{st} erhalten wir, indem wir von Gl. (37) ausgehen, und daraus erhalten wir:

$$\dot{r} = v \left\{ - \underbrace{\left(2B^2/r_0^2 + 2\alpha_0 r_0^2 / (1+r_0^2)^2 \right)}_{2x} + 2\bar{r}_0^{-1} r \dot{x} \right\}^{1/2}$$

$\xrightarrow{2} \quad \text{mit } 2x \approx a, \text{ und } 2\dot{x}\bar{r}_0^{-1} = b \quad (\text{Gl. 38 u. 39})$

$$\bar{r}_0 = 2v^2 \dot{x} \left(r/r_0 - \frac{a}{2x} \right); \text{ und dann nach } t \text{ differenziert:}$$

$$\ddot{r} = \dot{x} v^2 \bar{r}_0^{-1}; \quad \text{" " " zweimaliger Integration}$$

$$\text{über } t! \rightarrow \int \ddot{r} dt = \dot{r} = \dot{x} v^2 \bar{r}_0^{-1} t + C_0$$

$$\int \dot{r} dt = r = \dot{x} v^2 (2\bar{r}_0)^{-1} t^2 + C_0 t + C_1$$

$$\text{Für } t=0 \rightarrow C_1 = r_0 \quad \text{u.} \quad C_0 = 0$$

$$\rightarrow r = r_0 + \frac{\dot{x} v^2}{2\bar{r}_0} t^2 \quad \text{mit } \dot{x}/r_0 = \frac{1}{2} \text{ (nach Gl. (39))}$$

$$\dot{x}/r_0 \equiv b/2 = 4B^2/r_0^3 + 2\alpha_0 r_0 / (1+r_0^2)^2 + 2\alpha_0 r_0 \frac{(3r_0^2-1)}{(1+r_0^2)^3}$$

$$\text{und: } \dot{x} v^2 / r_0 = b v^2 \equiv \beta_{gr} \quad (E_{st} \text{ ist groß bzw. } r \text{ ist klein})$$

$$r = r_0 + \beta_{gr} t^2 / 2, \quad \beta_{gr} \text{ ist eine} \quad \text{---} \text{---} \text{---} \quad (43)$$

(zeitlich) konstante Beschleunigung.

5. Der zeitabhängige Radius des Potentialtopfes $R(t)$:

Wir können eine Beziehung zwischen $V_{\min}(r)$ (des H_2 -H System) und dem Radius R des Potentialtopfes, wie folgt herleiten:

Wir berücksichtigen, daß ω (als Maß der Niveauezahl im Potentialtopf) für den Fall von H_2 -Mol., für $l = 0$ wie es aus der Spektroskopie bekannt ist, konst. ist;

und mit,

$$V_{\min}(r = \infty) = -4.76 \text{ e.V.}$$

$$R(r = \infty) = 2.61 a_0$$

$V_{\min}(r)$ wird mit Hilfe der Kurven bei der Arbeit von Herrn Dr.

wrzesinsky und Herrn Prof. Großmann und von Herrn Boys and Shavitt; näherungsweise in einem Zusammenhang mit r und $r = \frac{\sqrt{3}}{2}s$ zu

einer Formel, die (empirisch) lautet:

$$V_{\min}(r) \approx \frac{a^3}{a^2 + 4(r - r_A)^2} \quad (45)$$

mit $a \approx 3.72$:

$$V_{\min}(r) = \frac{13.3}{3.6 + (r - r_A)^2} - 4.76$$

Aus $R_0 = \omega / \sqrt{2\mu} \frac{V_0}{\text{red.}}$

und auch:

$$R(r) = \omega / \sqrt{2\mu} \frac{V(r)}{\text{red. min}}$$

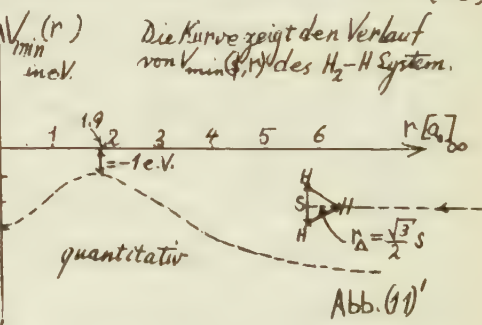
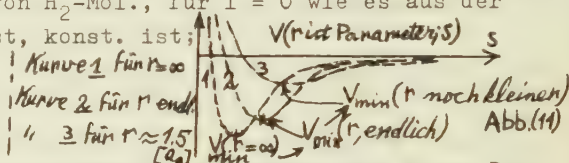
ω im allgemeinen, ist konst. erhalten wird

$$R(r) = R_0 \sqrt{V_0 / V_{\min}(r)} \quad (46)$$

$$R(r) = R_0 / \sqrt{1 - \frac{13.3 V_0}{3.6 + (r - r_A)^2}}$$

Das kann man aus den Kurven überprüfen (wie z.B. für die Kurve von $\sum r = 0$), wobei $s = 3.8$ und $V_{\min}(r = 0) = -2.8 \text{ e.V.}$

Aus Formel (43) für $r(t)$ geht Formel (47) für $R(r)$ in $R(t)$ über:



$$R(t) = R_0 \sqrt{1 - \frac{13.3/V_0}{3.6 + (r_0 + \beta t^2/2 + r_\Delta^2)^2}} \quad (48)$$

und aus $(1-x)^{-1/2} = 1 + x/2 + 3x^2/8 + \dots \approx 1 + 0.59x$, u. $V_0 = 4.76$,

$$\rightarrow \{R(t) = R_0 \left\{ 1 + 1.65 \left(3.6 + r_{0-\Delta}^2 + r_{0-\Delta} \beta t^2 + \beta^2 t^4/4 \right) \right\}, r_{0-\Delta} = r_0 - r_\Delta \} \quad (48)$$

oder: $R(t) = R_0 \left(1 + \frac{6.6/\beta^2}{a + b t^2 + t^4} \right) \quad (48)_1$

mit $a = 14.4/\beta^2 + 4(r_{0-\Delta})^2/\beta^2$; $b = 4r_{0-\Delta}/\beta$; $r_\Delta \approx 1.85$

Für unsere weitere Rechnung würden wir zu sehr komplizierten Integrationen kommen, wenn wir den Radius R von Formel (48) bei den später kommenden Integrationen (als Funktion von t) beibehalten würden.

Wir können aber R(r) näherungsweise gemittelt haben. Wollen wir den Mittelwert von R(t) in guter Näherung haben- ohne die Genauigkeit im wichtigen Bereich zu beschädigen- so nehmen wir R(t) zwischen R(r = 0, $r_\Delta \approx 1.8$) und R(r = r_Δ) d.h. zwischen

$$R(t) = R_0 \left(1 + \frac{6.6}{14.4 + 4(0 - r_\Delta)^2} \right) = \frac{1.24 R_0}{\text{genau} = 1.325 R_0} \quad (= 3.28, \text{od. genau nach Gl. (48)} = 3.46)$$

und

$$R(t) = R_0 \left(1 - 13.3/4.76 \times 3.6 \right)^{-1/2} = 2.12 R_0$$

d.h.:

$$R_{\text{gem.}}(t) = R(r = \infty) \times \left(\frac{1.32 + 2.12}{2} \right) = 1.72 R(r = \infty) \quad (48)_2$$

Tabelle (2)

$r [a_0]$	$V_{\text{min}}(r) [eV]$
∞	-4.76
5	-3.5
4	-3.2
3.8	-3.0
3	-2.5
2	-1.2
1.85	-1
1	-2.1
0	-2.9

VI Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit durch Dirac'sche Störung

1. Die theoretische Behandlung (im diskreten Spektrum)

Die Wellenfunktion von H_2 -Mol. bei der Störung $V\{r(t)\}$ geht bei $l = m = 0$, d.h. $Y_1^m(\vartheta, \varphi) = 1$ in den Radialteil der Wellenfunktion über:

$$\psi_0(s, \vartheta, \varphi, t) \xrightarrow[\text{(l=m=0)}]{\text{im kugelsymm. Pot.}} \psi(s, t)$$

$$i\hbar \partial \psi / \partial t = H_0(s) \cdot \psi + V(s, t) \psi \quad \text{--- (49)}$$

wo $H^0(s)$ der Operator der gesamten Energie des H_2 -Mol. bei fehlender Störung $V(t, s)$.

Um die Übergangswahrscheinlichkeit $w_{mn}(t)$ zu finden, empfiehlt es sich, die Gl. (49) in der Energie-Darstellung zu schreiben. Wir entwickeln $\psi(t, s)$ nach den Eigenfunktionen $\psi_k(s)$ des Operators H^0 :

$$\psi(s, t) = \sum_k c_k(t) \psi_k(s) \exp(-i E_k t) \quad , (k=1, 2, E) \text{ --- (50)}$$

Wir setzen ψ (für diskretes Spektrum) in Gl. (49) ein, multiplizieren mit $\psi_m^*(s) e^{i E_m t}$ und über s integrieren, dann erhalten wir bekanntlich (49) in der E-Darstellung:

$$i \dot{c}_m = \sum_k V_{mk}(t) e^{i(E_m - E_k)t} c_k(t) \quad \text{--- (51)}$$

(mit $H^0 \psi_k(s) = E_k \psi_k(s)$)

Hier ist $V_{mk}(t)$ das Matrixelement der Störenergie:

$$V_{mk}(t) = \int \psi_m^*(s) V(t) \psi_k(s) ds \quad \text{--- (52)}$$

Für den Ausgangszustand wird angenommen, daß sich H_2 -Molekül im Zustand $E = E_n$ befindet. Folglich ist bei $t = -\infty$:

$$c_k(-\infty) = \begin{cases} 1 & \text{für } k = n \\ 0 & \text{für } k \neq n \end{cases} \quad \text{--- (53)}$$

$c_k(t)$ werden konst. bei vollständigen Vernachlässigung von V .
 Als nullte Näherung für $c_k(t)$ kann man daher ihre Ausgangswerte
 (52) nehmen: $c_k^0(t) = \delta_{nk}$

Setzen wir diese Werte in die rechte Seite von (51) ein, so finden wir für die erste Näherung $c_m^1(t)$:

$$i \frac{d c_m^{(1)}(t)}{dt} = \sum_k V_{mk}(t) \cdot \exp(i \omega_{mk} t) \cdot c_k^{(0)} = V_{mn} e^{i \omega_{mn} t} \quad \text{--- (53)}$$

mit $\omega_{mn} = |E_m - E_n|/\hbar$, $\hbar = 1$

$$\rightarrow C_m^{(1)}(t \rightarrow \infty) = -i \int_{-\infty}^{\infty} V_{mn}(t) \exp(i \omega_{mn} t) dt + \delta_{mn} \quad \text{--- (54)}$$

Für die zweite Näherung, setzen wir $c_m^1(t)$ in die rechte Seite von Gl. (51) ein:

$$i \dot{C}_m^{(2)}(t) = \sum_k V_{mk}(t) e^{i \omega_{mk} t} C_k^{(1)}(t) \quad \text{--- (55)}$$

$$\rightarrow C_m^{(2)}(t \rightarrow \infty) = -i \int_{-\infty}^{\infty} V_{mn}(t) e^{i \omega_{mn} t} C_n^{(1)}(t) dt \quad \text{--- (56)}$$

sind bekannte Funktionen der Zeit, Gl. 54)

Die Wahrscheinlichkeit einen H_2 -Mol. zum Zeitpunkt t im Zustand $E = E_m$ zu finden ist $|c_m(t)|^2$; daher ist die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs von E_n nach E_m bis zum Zeitpunkt t ;

$$W_{mn}(t \rightarrow \infty) = |c_m(t \rightarrow \infty)|^2 \quad \text{--- (57)}$$

Unsere Aufgabe besteht zuerst darin, die Wirkungsquerschnitte

$\sigma_{E_n \rightarrow E_m}(E_{gt})$ und dann (Am Schluß der Arbeit) $Q_{E_n \rightarrow \text{Diss.}}$ als Funktion von der Stoßenergie $(E)_{gt}$ zu berechnen.

Das Näherungsverfahren kann immer weiter gesetzt werden und die Zeitabschnitte kleiner gemacht werden, je $V(t)$ größer wird.

Ist jedoch $V(t,s)$ - wie es bei uns der Fall ist - klein, dann kann man sich auf die erste oder zweite Näherung beschränken.

Die Übergangswahrscheinlichkeit W_{mn} (von Zustand bei $E_n \rightarrow E_m$) ist:

$$W_{mn} = |C_m(t \rightarrow \infty)|^2 = \left| -i \int_{-\infty}^{\infty} V_{mn}(t) e^{i \omega_{mn} t} dt \right|^2 \quad \text{--- (57)}$$

2. Zweistufenpotentialtopf

Bei der Annäherung eines H-Atoms zu einem H_2 -Mol. bleibt der Potentialtopf des H_2 -mol. bezuglich der zwei Parameter $V_0(r=\infty)$ und $R(r=\infty)$ nicht konst. sondern erhebt sich immer wieder auf, und immer wieder breiter, und dann wird er wieder- nach einer bestimmten Kernkonfiguration- etwa tiefer und enger. Deshalb läßt es sich in der Art verbessern, daß wir jetzt einen Zweistufenpotentialtopf als Potential einführen.

$$V(r,s) = \begin{cases} V(r) + V_0 & 0 \leq s \leq R_0 & \text{I} \\ V_1(r) & R_0 \leq s \leq R & \text{II} \\ 0 & R < s & \text{III} \end{cases}$$

Und wo das H-Atom im Unendlichen:

$$V(r=\infty, s_0) = \begin{cases} +V_0 & 0 \leq s \leq R_0 & \text{I} \\ 0 & \text{für } s > R_0. & \text{III} \end{cases} \quad -V_0$$

Das stehende H-Atom bewegt sich im Potential $V(r,s)$:

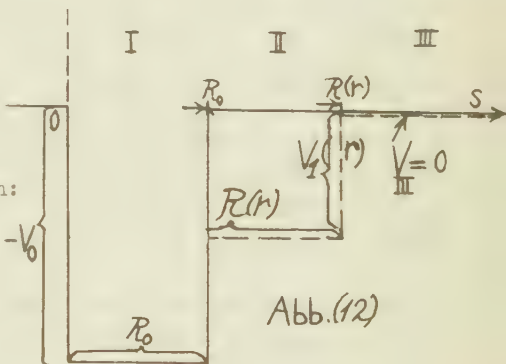
$$V(r,s) = V(r, s_0 = 1.4, -V(\text{des } H_2\text{-mol.}))$$

$$\text{Im Gebiet I: } V(r,s) - V_0(\infty, s_0) = V(r) - V_0 - (-V_0) = V(r) \quad (61)$$

$$\text{Im Gebiet, wo } R_0 \leq s \leq R(r): V(r,s) - V_0(\infty, s_0) = V_1(r) - 0 = V_1(r) \quad (61)$$

aus der Tabelle der Arbeit von Herrn Dr. wrlesinsky für $V(r)$,
machen wir einen Ansatz der Form:

$$V(r) = \frac{\alpha}{b + cr^2} - |V_0|$$



Damit $V(r)$ aus der Tabelle (3) mit $V(r)$ von dem Ansatz (ungefähr) übereinstimmt nehmen die Konstante α , b, c folgende Werte an:

$\alpha = 26.5$, $b = 1$, $c = 1$; und daraus lautet der Ansatz wie folgt:

$$V(r) = \frac{26.5}{1 + r^2}$$

Analog finden wir für $V_1(r)$ (für den zweiten Topf) folgende zwei Formen; die erste davon, wie man aus der Tabelle (3) sieht, ist nur für die Werte $r = 2, r = 4$ stimmt besser mit $V(r)$ als die zweite.

$$V_1(r) = -2.1 \exp. (-0.175 r^2) \text{ e.V.} \dots\dots\dots (62)_1$$

$$V_1(r) = \frac{-88.8}{(6 + r^2)^2} \text{ e.V.} \dots\dots\dots (62)_2$$

Bei der weiteren Berechnung der Matrixelementen bei dem zweiten Potentialtopf wird die Formel $(62)_2$ benutzt und vorgezogen, da sie allgemeiner als Formel $(62)_1$ und außerdem ist sie bei der Berechnung der Matrixelementen und danach Übergangsamplituden angenehmer als die erste Formel.

Tabelle (3)

r	$V(r)$	$V_1(r)$ aus d. Kurve	$V_1(r), G_1$ (62) ₁	$V_1(r), G_2$ (62) ₂
∞	-4.76	0	0	0
10	-4.76	-.0045	0	-.009
5	-3.5	-.086	-.0273	-.1
4	-3.25	-.156	-.128	-.2
3	-2.58	-.386	-.433	-.423
2	-2.5	-.1778	-1.043	-.924
1	-1.8	-1.9	-1.764	-1.82
0	-21.7	-2.14	-2.11	-2.2

$\uparrow$
 mit Hilfe
 d. Kurve
 und einig-
 en Betrachtungen

3. Die Matrixelemente von $V_{mn}(t)$ in den Gebieten I, II, III

Die Matrixelemente $V_{mn}(t)$ werden in erster Näherung für die Gebiete I (d.h. erste Stufe), II (d.h. zweite Stufe) und III (wo das H_2 -Potential, praktisch, Null ist).

Mit den Wellenfunktionen von H_2 -Mol., die man in (64) findet, lauten dann die Matrixelemente wie folgt:

$$\begin{aligned} V_{mnI}(t) &= \int_0^{R_0} \psi_m(s) \left\{ \alpha / (1+r^2) \right\} \psi_n(s) ds \\ V_{mnII}(t) &= \int_{R_0}^{R(r)} \varphi_m(s) \left\{ -88.8 / (6+r^2)^2 \right\} \varphi_n(s) ds \quad \dots\dots\dots (63) \\ V_{mnIII}(t) &= \int_{R(r)}^{\infty} \varphi_m(s) \cdot 0 \cdot \varphi_n(s) ds = 0 \end{aligned}$$

a) Für den Potentialtopf (d.h. von 0 bis R_0):

$$V_{mnI}(t) = \frac{\alpha b_m b_n}{27 \cdot 21 (1+r^2)} \int_0^{R_0} \underbrace{\sin(k_n s) \sin(k_m s)}_{d_{mn}} ds$$

$$\int_0^{R_0} d_{mn} = \frac{k_m^2}{k_m^2 - k_n^2} \left[k_m^{-2} k_n \cos(k_n s) \sin(k_m s) - \sin(k_n s) \cos(k_m s) k_m^{-1} \right]_0^{R_0}$$

Die Gl. (26): $|\cos k_n R_0| = \frac{k_n R_0}{\omega} \equiv k_n R_0 / R_0 \sqrt{1 - k_n^2 R_0^2}$ ist für ungerade Terme n , (die unerlaubt sind); deshalb schreiben wir $\cos(k_n R_0)$ in $\sqrt{1 - \sin^2(k_n R_0)}$ um, da die Gl. (24): $\sin k_n R_0 = k_n R_0 / \omega$ für gerade Terme n (die erlaubt sind) gilt.

$$\cos k_n R_0 = \{1 - \sin^2 k_n R_0\}^{1/2} = \{1 - k_n^2 R_0^2 / \omega^2\}^{1/2} \quad \text{--- Gl. (64) ---}$$

$$\rightarrow \int_0^{R_0} d_{mn} = [d_{mn}]_0^{R_0} = \frac{k_m^2}{k_m^2 - k_n^2} \left(\frac{k_n R_0 \sqrt{1 - k_m^2 R_0^2}}{\omega k_m} + \frac{k_n k_m R_0}{k_m \omega} \sqrt{1 - k_n^2 R_0^2} \right)$$

$$= \frac{k_n k_m R_0 (R_0 k_m \sqrt{1 - k_n^2 R_0^2} - k_n R_0 \sqrt{1 - k_m^2 R_0^2})}{\omega^2 (k_m^2 - k_n^2)}$$

$r = R_0 + \frac{\beta}{2} t^2$

$\psi_m = \begin{cases} \psi_m(s) = b_m \sin(k_m s) \\ \varphi_m(s) = c_m e^{-k_m s} \end{cases}$ --- S ---

für disk. Sp.

$b_m = \{2 \delta_m (1 + \delta_m R_0)\}^{1/2}$

$c_m = b_m \sin k_m R_0 e^{k_m R_0}$

$k_m = \{2 \mu (V_0 + E_m)\}^{1/2}$

$\delta_m = \{2 \mu |E_m|\}^{1/2}$ neg.

und mit $\omega = \sqrt{2\mu V_0} R_0$ erhalten wir:

$$l_{mn}|_{R_0} - l_{mn}|_0 = l_{mn}|_{R_0} = \frac{k_n R_0 k_m R_0 / \omega^2}{\sqrt{2\mu E_m} - \sqrt{2\mu E_n}} = \frac{k_n k_m R_0^2}{\omega^2 (k_n + k_m)}$$

$$\rightarrow V_{mnI} = \frac{\alpha b_m b_n}{2.721(1+r^2)} \cdot \frac{k_n k_m R_0^2}{\omega^2 (k_n + k_m)} = \alpha_{mnI} \frac{1}{(1+r^2)} \quad \dots (65)$$

b) Für den Potentialtopf: R_0 bis $R(r)$

$$V_{mnII}(t) = -2.2 c_m c_n \times \frac{88.8/27.21}{(6+r^2)^2} \int_{R_0}^{R(r)} e^{-(k_n + k_m)s} ds$$

$$= \frac{7.18 C_m C_n}{(6+r^2)^2 (k_n + k_m)} \left[\exp\{-R(r)(k_n + k_m)\} - \exp\{-R_0(k_n + k_m)\} \right]$$

wenn wir bei der Integration $R(r)$ als Variable beibehalten, finden wir dann beim Durchführen der Integration sehr komplizierte Formel für die Matrixelemente von $V_{mnII}(t)$ vor; jene Formel, die wir früher oder später bei der Berechnung der Übergangsamplituden und Übergangswahrscheinlichkeiten, gezwungen werden, sie zu approximieren. Deshalb nehmen wir von jetzt an (wie früher schon erwähnt) den Mittelwert von $R(r)$ für den wichtigen Bereich und gleich (wie in Formel (5.7)) $1.71 R_0$ ohne die Genauigkeit zu beschädigen.

$$\rightarrow V_{mnII} = \frac{7.18 C_m C_n}{(6+r^2)^2 (k_n + k_m)} e^{-R_0(k_n + k_m)} \left(e^{-1.71(k_n + k_m)R_0} - 1 \right) \quad \dots (66)$$

$$= \frac{1}{(6+r^2)^2} \alpha_{mnII} \quad (66)_1$$

c) Für den Bereich, wo s größer als $R(r)$ (d.h. $V = 0$)

Für diesen Bereich erhalten wir für $V_{mnIII}(t)$, wie in Formel (63), den Wert Null.

4. Die Übergangsamplituden C_{mI} , C_{mII}

Die gesamte Übergangsamplitude C_m setzt sich aus C_{mI} u. C_{mII} zusammen:

$$C_{n \rightarrow m}(t \rightarrow \infty) = C_{n \rightarrow m, I} + C_{n \rightarrow m, II}$$

$C_m^1(t \rightarrow \infty)$ erhalten wir, indem wir $V_{mn}(t)$ aus (63) in (54) einsetzen:

$$\begin{aligned} a) C_{mI}^1(t \rightarrow \infty) &= -i \alpha_{mn} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(E_m - E_n)t}}{1 + v_0^2 + v_0^2 \beta^2 t^2 + \beta^2 t^4/4} dt \\ &= -i \frac{4}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha_{mn} e^{i(E_m - E_n)t}}{\alpha_1 + \beta_1 t^2 + t^4} dt = -4i \beta^{-2} \alpha_{mn} \int_{-\infty}^{\infty} X_1(t) dt \end{aligned} \quad (67)$$

$$\text{mit: } \alpha_1 = \frac{4}{\beta^2}(1 + v_0^2), \quad \beta_1 = 4v_0/\beta;$$

$$X_1(t) = \frac{e^{i\omega_{mn}t}}{\alpha_1 + \beta_1 t^2 + t^4}; \quad \omega_{mn} = E_m - E_n; \quad \hbar = 1$$

wir brauchen also $\int_{-\infty}^{\infty} X_1(t) dt$ zu berechnen. Dazu wählen wir die analytische Funktion:

$$X(\tau) = \frac{e^{i\omega_{mn}\tau}}{\alpha_1 + \beta_1 \tau^2 + \tau^4}, \quad (\tau \text{ komplex})$$

$$\text{die für } \tau^4 + \beta_1 \tau^2 + \alpha_1 = 0 \quad \text{--- (68)}$$

zwei einfache Pole in der oberen imaginären Halbebene ($\text{Im. } \tau > 0$) hat.

Zunächst lesen wir Gl. (68) nach auf, wie auf Seite (35) gemacht werden wird.

wir lösen nun Gl. (68) nach z^2 auf:

$$z^2 = -\beta_1/2 \mp i \sqrt{\alpha_1 - \beta_1^2/4}$$

$$\rightarrow z_{\mp 1,2} = \mp \sqrt{-\beta_1/2 \mp i \sqrt{\alpha_1 - \beta_1^2/4}}$$

$$z_1 = x + iy = \sqrt{-\beta_1/2 \mp i \sqrt{\alpha_1 - \beta_1^2/4}}$$

$$\rightarrow x = \mp \sqrt{\alpha_1/2 - \beta_1/4}, \quad y = \mp \sqrt{\alpha_1/2 + \beta_1/4}$$

$$\rightarrow z_1 = \mp \sqrt{\alpha_1/2 - \beta_1/4} + i \sqrt{\alpha_1/2 + \beta_1/4} \leftarrow \text{beide interessieren uns;}$$

$$z_2 = \sqrt{-\beta_1/2 - i \sqrt{\alpha_1 - \beta_1^2/4}}$$

$$x = \pm \sqrt{\alpha_1/2 - \beta_1/4}, \quad y = \pm \sqrt{\alpha_1/2 + \beta_1/4}$$

$$\rightarrow z_2 = \pm \sqrt{\alpha_1/2 - \beta_1/4} + i \sqrt{\alpha_1/2 + \beta_1/4}$$

Wie zwei Pole, wo $\text{Im.}(z) > 0$, sind:

$$z_+ = \sqrt{\alpha_1/2 - \beta_1/4} + i \sqrt{\alpha_1/2 + \beta_1/4} \quad z_- = \sqrt{\alpha_1/2 - \beta_1/4} + i \sqrt{\alpha_1/2 + \beta_1/4} \quad \equiv \sqrt{-} + i\sqrt{+} \quad (69)$$

$$z_- = \sqrt{\alpha_1/2 - \beta_1/4} + i \sqrt{\alpha_1/2 + \beta_1/4}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} X(t) dt = 2\pi i \sum \text{Res.} \{X(t) | t = z_+, z_-\}$$

Längs des oberen Halbkreises in der Abb. (12) gilt wegen:

$$|z^4 + \beta_1 z^2 + \alpha_1| > |z^4 + \beta_1 z^2 - \alpha_1| \quad L = \sqrt{-} + i\sqrt{+}$$

$$\rightarrow [(R^4 e^{4i\varphi} + R^2 \beta_1 e^{2i\varphi})(R^4 e^{-4i\varphi} + R^2 \beta_1 e^{-2i\varphi})]^{1/2} - \alpha_1$$

$$= R^2 \sqrt{R^4 + 2\beta_1 R \cos 2\varphi + \beta_1^2} - \alpha_1 > R^2 \sqrt{R^4 + \beta_1^2} - \alpha_1$$

$$\text{außerdem ist: } |e^{-R \sin \varphi}| \leq 1$$

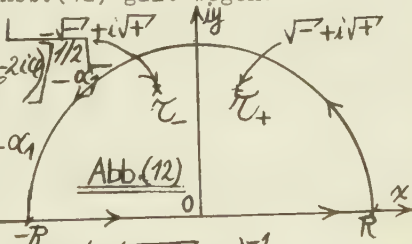
$$\rightarrow \left| \int_0^\pi f(R e^{i\varphi}) R e^{i\varphi} i d\varphi \right| \leq \int_0^\pi |f(R e^{i\varphi})| R d\varphi \leq \pi (R^2 \sqrt{R^4 + \beta_1^2} - \alpha_1)^{-1}$$

d.h. das Integral strebt längs des oberen Halbkreises, für

$R \rightarrow \infty$, gegen Null.

$$\text{Res} \{X(t) | t = \sqrt{-} + i\sqrt{+}\} = \lim_{t \rightarrow z_+} \frac{e^{i\omega_m t} (z_- - \sqrt{-} - i\sqrt{+})}{(z_+^2 + \beta_1/2 + i\sqrt{\alpha_1 - \beta_1^2/4})(z_+^2 + \beta_1/2 - i\sqrt{\alpha_1 - \beta_1^2/4})}$$

$$= \frac{\exp\{i\omega_m (\sqrt{-} + i\sqrt{+})\}}{(z_+^2 + \beta_1/2 + i\sqrt{\alpha_1 - \beta_1^2/4})(z_- + \sqrt{\alpha_1 - \beta_1^2/4} + i \sqrt{\alpha_1/2 + \beta_1/4})}$$



$$\frac{i \omega_{mn} (\sqrt{-1+i} \sqrt{+1})}{4i \sqrt{\alpha_1 - \beta^2/4} (\sqrt{-1+i} \sqrt{+1})} = \frac{\beta e^{i(\sqrt{-1+i} \sqrt{+1}) \omega_{mn}}}{8i (\sqrt{-1+i} \sqrt{+1})}$$

und analog wird, wobei $\sqrt{\pm 1} \equiv \sqrt{\alpha_1/2 \pm \beta/4}$, $\sqrt{\alpha_1 - \beta^2/4} = 2/\beta$

$$\rightarrow \text{Res}\{X_1(t) | \tau_- = -\sqrt{-1+i} \sqrt{+1}\} = \frac{-\beta e^{i \omega_{mn} (\sqrt{-1+i} \sqrt{+1})}}{8i (-\sqrt{-1+i} \sqrt{+1})}$$

Die Summe von beiden ist das gesuchte Residuum:

$$\begin{aligned} \sum_{\tau_+, \tau_-} \text{Res } X_1(t) &= \frac{\beta}{8i} e^{-\omega_{mn} \sqrt{+1}} \left[\frac{e^{i \omega_{mn} \sqrt{-1}}}{\sqrt{-1+i} \sqrt{+1}} - \frac{e^{-i \omega_{mn} \sqrt{-1}}}{-\sqrt{-1+i} \sqrt{+1}} \right] \\ &= \frac{\beta/4}{i \sqrt{\alpha_1}} e^{-\omega_{mn} \sqrt{+1}} \left(\sqrt{-1} \cos(\omega_{mn} \sqrt{-1}) + \sqrt{+1} \sin(\omega_{mn} \sqrt{-1}) \right) \end{aligned}$$

$$\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} X_1(t) dt = \frac{\pi \beta^2 e^{-\omega_{mn} \sqrt{+1}}}{4 \sqrt{1+\beta_0^2}} \left(-\sqrt{-1} \cos(\omega_{mn} \sqrt{-1}) + \sqrt{+1} \sin(\omega_{mn} \sqrt{-1}) \right) \quad (70)$$

$$\rightarrow \left[C_{m1}^{(1)}(t \rightarrow \infty) \equiv C_{n \rightarrow m1}^{(1)}(t \rightarrow \infty) = \frac{-i \alpha_{mn1} \pi e^{-\omega_{mn} \sqrt{+1}} (\sqrt{-1} \cos(\omega_{mn} \sqrt{-1}) + \sqrt{+1} \sin(\omega_{mn} \sqrt{-1}))}{\sqrt{1+\beta_0^2}} \right] \quad (71) \quad \text{---}$$

(Zurückkehrung: $(\sqrt{-1} \cos(\omega_{mn} \sqrt{-1}) + \sqrt{+1} \sin(\omega_{mn} \sqrt{-1})) \equiv \rho_{mn}$)

$$\rightarrow \text{in 2. Näherung: } i \dot{C}_{m1}^{(2)}(t \rightarrow \infty) = \sum_k V_{mk}(t) e^{i \omega_{mn} t} C_k^{(1)}(t \rightarrow \infty) =$$

$$= V_{mn}(t) e^{i \omega_{mn} t} (-i \alpha_{mn1}) \frac{\pi e^{-\omega_{mn} \sqrt{+1}} \rho_{mn1}}{\sqrt{1+\beta_0^2}}$$

$$\rightarrow C_{m1}^{(2)}(t \rightarrow \infty) = \frac{-e^{-\omega_{mn} \sqrt{+1}} \pi \alpha_{mn1} \rho_{mn1}}{\sqrt{1+\beta_0^2}} \int_{-\infty}^{\infty} (4/\beta^2) \alpha_{mn1} X_1(t) dt, \quad \int_{-\infty}^{\infty} X_1(t) dt \text{ ist aus Gl. (70) zu kriegen.}$$

$$\rightarrow \left[C_{m1}^{(2)}(t \rightarrow \infty) = \frac{-e^{-2\omega_{mn} \sqrt{+1}}}{(1+\beta_0^2) \beta^2} \pi^2 \overset{2}{\rho_{mn1}} \overset{2}{(4)} \overset{2}{\alpha_{mn1}} \right] \quad \text{--- (72)}$$

Berechnung von $C_{mn}^{(1)}(t \rightarrow \infty) =$

$$C_{mn}^{(1)} = -i \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega_{mn}t) \chi_{X_{mn}} / (t+i)^2 dt =$$

$$= -i \chi'_{mn} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega_{mn}t) / (\chi_2 + \beta_2 t^2 + t^4) dt = -i \chi'_{mn} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t) dt \quad (73)$$

$$\chi'_{mn} = \chi_{mn} \cdot \frac{16}{3^2} \quad (74)$$

Berechnung von $\int_{-\infty}^{\infty} \chi(t) dt$

Nachfolgend wird bei der Bestimmung von C_{mI} - berechnen wir zuerst das Integral $\int_{-\infty}^{\infty} \chi_{II}(t) dt$. Dann setzen wir das Ergebnis in (73) ein. Das verfahren ist ähnlich wie bei der Berechnung von $\int_{-\infty}^{\infty} \chi(t) dt$.

da nur die Gl. $\alpha_2 + \beta_2 t^2 + t^4 = 0$

$$(75)$$

nach t^2 auflösen

(wobei $\chi_{II}(t)$ in der oberen Halbebene $\text{Im}(t) \geq 0$ zwei Pole für $n=2$ - zweiter Ordnung hat)

$$\left. \begin{aligned} &= \sqrt{\alpha_2/2 - \beta_2/4} + i\sqrt{\alpha_2/2 + \beta_2/4} = \sqrt{-2} + i\sqrt{+2} \\ &= \sqrt{\alpha_2/2 - \beta_2/4} + i\sqrt{\alpha_2/2 + \beta_2/4} = -\sqrt{-2} + i\sqrt{+2} \end{aligned} \right\} \quad (76)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \chi_{II}(t) dt = 2\pi i \sum \text{Res}(\chi_{II}(t))_{\tau_+, \tau_-}$$

$$\text{Res}\{\chi_{II}(t) | t = \tau_+ = \sqrt{-2} + i\sqrt{+2}\} = \lim_{t \rightarrow \tau_+} \frac{d}{dt} \frac{e^{i\omega_{mn}t}}{(t^2 + \beta_2/2 + i\sqrt{\alpha_2 - \beta_2^2/4})^2 (t^2 + \beta_2/2 - i\sqrt{\alpha_2 - \beta_2^2/4})^2}$$

$$= \frac{d}{dt} \left[\frac{e^{i\omega_{mn}t}}{(t + \sqrt{-2} + i\sqrt{\alpha_2 - \beta_2^2/4})^2 (t^2 + \beta_2/2 + i\sqrt{\alpha_2 - \beta_2^2/4})^2} \right]_{t=\tau_+}, \quad \sqrt{-2} \equiv \sqrt{\alpha_2 - \beta_2^2/4}$$

$$= e^{i\omega_{mn}\tau_+} \frac{2i\omega_{mn}(\sqrt{-2} + i\sqrt{+2})(\sqrt{-2})^2 + (\sqrt{-2} + i\sqrt{+2})(\sqrt{-2})^2 - 2i\sqrt{-2}(\sqrt{-2} + i\sqrt{+2})^3}{16(\sqrt{-2} + i\sqrt{+2})^4 (\sqrt{-2})^4}$$

$$= \frac{e^{i\omega_{mn}\tau_+}}{16(\sqrt{-2})^3} \frac{-i\omega_{mn}(\sqrt{-2} + i\sqrt{+2})\sqrt{-2} + (\sqrt{-2})^2 - 2i(\sqrt{-2} + i\sqrt{+2})^2}{(\sqrt{-2} + i\sqrt{+2})^3} = \frac{e^{i\omega_{mn}\tau_+}}{16\sqrt{-2}^3} \frac{A_+}{(\sqrt{-2} + i\sqrt{+2})^3} \quad (77)$$

$$\text{Res}\{\chi_{II}(t) | t = \tau_- = -\sqrt{-2} + i\sqrt{+2}\} = \lim_{t \rightarrow \tau_-} \frac{d}{dt} \frac{e^{i\omega_{mn}t} (t + \sqrt{-2} - i\sqrt{+2})^2}{(t^2 + \beta_2/2 + i\sqrt{\alpha_2 - \beta_2^2/4})^2 (t^2 + \beta_2/2 - i\sqrt{\alpha_2 - \beta_2^2/4})^2}$$

$$= e^{i\omega_{mn}\tau_-} \frac{-i\omega_{mn}(-\sqrt{-2} + i\sqrt{+2})(\sqrt{-2}) + (-\sqrt{-2} + i\sqrt{+2})(\sqrt{-2}) + 2i(-\sqrt{-2} + i\sqrt{+2})^2}{16(-\sqrt{-2} + i\sqrt{+2})^3 (\sqrt{-2})^3}$$

$$= \frac{e^{i\omega_{mn}\tau_-}}{16\sqrt{-2}^3} \frac{A_-}{(-\sqrt{-2} + i\sqrt{+2})^3} \quad (78)$$

ie Summe von (7) u. (8)

$$\underset{\sim}{\text{Res}} \{X(t)|_{t=\tau_+, \tau_-}\} = \frac{e^{-\omega_{\min} \sqrt{+}}}{16(\sqrt{-})^3} \left[\frac{e^{+i\omega_{\min} \sqrt{-}} A_+}{(\sqrt{-} + i\sqrt{+})^3} + \frac{e^{-i\omega_{\min} \sqrt{-}} A_-}{(\sqrt{-} + i\sqrt{+})^3} \right]$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} X(t) dt = \frac{1}{8(\sqrt{-})^3} \left[\frac{\cos \omega_{\min} \sqrt{-} + i \sin \omega_{\min} \sqrt{-}}{(\sqrt{-} + i\sqrt{+})^3} A_+ + \frac{\cos \omega_{\min} \sqrt{-} - i \sin \omega_{\min} \sqrt{-}}{(\sqrt{-} + i\sqrt{+})^3} A_- \right] \left(-\alpha_2^{3/2} \right)$$

$$= \frac{1}{-8\sqrt{-}^3 \alpha_2^3} \left\{ i \cos(\omega_{\min} \sqrt{-}) (2\omega_{\min} \sqrt{-}^4 - 2\omega_{\min} \sqrt{+}^4 + 9\sqrt{-} \sqrt{-}^2 - 6\sqrt{+} \sqrt{-}^2 - 2\beta_2 \sqrt{-}^3 + 3\beta_2 \sqrt{+} \sqrt{-}) + i \sin(\omega_{\min} \sqrt{-}) (2\omega_{\min} \sqrt{-}^2 \sqrt{-}^2 - \omega_{\min} \sqrt{+}^2 \sqrt{-}^2 - 3i\omega_{\min} \sqrt{+}^2 \sqrt{-}^2 - 6\sqrt{-} \sqrt{-}^3 - 9i\sqrt{+} \sqrt{-}^2 - 3\beta_2 \sqrt{-} \sqrt{-} + 2\beta_2 \sqrt{+} \sqrt{-}^3) \right\}$$

und beim Rausgehen der $\sqrt{-}$ erhalten wir: -

$$\underset{\sim}{\int} X(t) dt = \frac{\pi e^{-\omega_{\min} \sqrt{+}} \beta^5}{1664 (6.5 + 1/6)^{3/2}} \left\{ \cos(\omega_{\min} \sqrt{-}) (2\omega_{\min} \sqrt{-}^4 - 2\omega_{\min} \sqrt{+}^4 + 9\sqrt{-} \sqrt{-} - 6\sqrt{+} - \beta_2 \frac{\sqrt{-}^3}{\sqrt{+}} + 3\beta_2 \sqrt{+}) + \sin(\omega_{\min} \sqrt{-}) (2\omega_{\min} \sqrt{-}^2 \sqrt{-} - \omega_{\min} \sqrt{+}^2 \sqrt{-} - 3i\omega_{\min} \sqrt{+}^2 \sqrt{-} - 6\sqrt{-}^3 - 9i\sqrt{+} \sqrt{-} - 3\beta_2 \sqrt{-} + \beta_2 \sqrt{+}^2 \sqrt{-}) \right\} \quad (73)$$

Der Übergangsampl. $C_{\text{II}}^{(t \rightarrow \infty)}$ nach Gl. liefert uns dann:

$$\underset{\sim}{C}_{\text{II}}^{(t \rightarrow \infty)} = \frac{-1 \alpha_{\min} \pi e^{-\omega_{\min} \sqrt{+}} \beta^3}{64 (6.5 + 1/6)^{3/2}} \left\{ \cos(\omega_{\min} \sqrt{-}) \left(\frac{1}{2} \omega_{\min} \left(\frac{\sqrt{-}}{\sqrt{+}} \right)^2 - \frac{1}{2} \omega_{\min} \left(\frac{\sqrt{+}}{\sqrt{-}} \right)^2 + \frac{9}{2} \frac{1}{\sqrt{+}} - \frac{3}{2} \frac{\sqrt{+}}{\sqrt{-}^2} - \frac{1}{4} \frac{\beta_2}{\sqrt{+}^3} + \frac{3}{2} \frac{\beta_2}{\sqrt{+} \sqrt{-}} \right) + \sin(\omega_{\min} \sqrt{-}) \left(-\frac{\omega_{\min}}{2} \frac{\sqrt{+}}{\sqrt{-}} - \frac{3i\omega_{\min}}{2} \frac{\sqrt{+}}{\sqrt{-}} - \frac{3}{2} \frac{\sqrt{-}}{\sqrt{+}^2} - \frac{9i}{2} \frac{1}{\sqrt{-}} - \frac{3\beta_2}{2\sqrt{+} \sqrt{-}} + \frac{\beta_2}{4} \frac{1}{\sqrt{-}^3} \right) \right\} \quad (74)$$

Am nächsten wollen wir die mit $\cos$ u. $\sin$ multiplizierte Klammer vereinfachen. Dafür prüfen wir die Größenordnung

Am nächsten wollen wir, die mit $\cos(-)$ und $\sin(-)$ multiplizierte Klammer vereinfachen. Dafür prüfen wir die Größenordnung der in den Klammern stehenden
wir diskutieren die Klammterglieder von Gl. (79) um sie zu vereinfachen:

a) ω_{mn} hat den Betrag, für verschiedene m und n, von (ungefähr) Null (z.B. für den Übergang 0 zu 1) ... als Minimum, bis $V_0/27.21 = 0.17$ (für den Übergang 0 zum Ende des disk. Spektrum ... als Maximum.

d.h. ω_{mn} ist durchschnittlich klein.

$$b) \frac{\sqrt{-2}}{\sqrt{+2}} = \frac{\sqrt{6 + r_0^2} - r_0}{\sqrt{6 + r_0^2} + r_0} \approx 1/3$$

und je r_0 größer wird, desto der Bruch kleiner wird:

$$\rightarrow (\sqrt{+2}/\sqrt{-2})^2 \approx 9$$

und wird größer, je r_0 größer wird;

d.h. $(\sqrt{+2}/\sqrt{-2})^2 \omega_{mn}$ ist nicht zu vernachlässigen, besonders für große Übergänge vom H_2 -Zustand.

$$c) \frac{1}{\sqrt{-2}} (\sqrt{\beta}) , \frac{1}{\sqrt{+2}} (\sqrt{\beta}) , \frac{\sqrt{+2}}{(\sqrt{-2})^2} (\beta^{1/2}) , \frac{\sqrt{-2}}{(\sqrt{+2})^2} (\beta^{1/2})$$

diese Brüche sind also auch zu vernachlässigen, da die konstante Beschleunigung in unseren atomaren Einheiten sehr klein ist.

$$d) \frac{\beta_2}{(\pm 2)^3} (\beta^{1/2}) \quad \text{und} \quad \frac{\beta_2}{\sqrt{\pm 2}} (\beta^{1/2})$$

diese beide Brüche sind auch zu vernachlässigen ($\beta^{1/2} = \frac{0.77v}{r_0}$ und v sehr klein ist).

Nach diesen Vereinfachungen nimmt dann $C_{mII}(t)$ eine einfachere Form, nämlich

$$C_{mII}^{(1)}(t \rightarrow \infty) =$$

$$C_{mII}^{(1)}(t \rightarrow \infty) = \frac{i \alpha_{mnII} \pi \cdot e^{-\frac{\omega \sqrt{1+2}}{\beta^3}}}{64(6+r_0^2)^{3/2}} \quad \times \downarrow$$

$$\times \cos(\omega_{mn} \sqrt{1+2}) \frac{\sqrt{1+r_0^2} \sqrt{6+r_0^2}}{1.65} \omega_{mn}$$

$$= \frac{i \omega_{mn} \alpha_{mnII} \pi \beta^3}{3.3 \times 64(6+r_0^2)} \times \text{nach Tab. (4)}_1$$

$$\times \cos(\omega_{mn} \sqrt{1+2}) \sqrt{1+r_0^2} \quad \text{--- (80)}$$

r_0	$\sqrt{6+r_0^2} + r_0$	$\sqrt{6+r_0^2} - r_0$
0	1.562	1.562
1/2	1.732	1.414
1	1.908	1.281
2	2.272	1.072
3	2.620	0.933
4	2.948	0.831
5	3.251	0.755
7	3.790	0.645

Tabelle (4)

Und da $\sqrt{1+2} \approx 2\sqrt{1}$

wird dann $\cos(\omega_{mn} \sqrt{1+2}) = 1 - 2\sin^2(\omega_{mn} \sqrt{1})$; und mit:

$$\alpha_{mnII} = \frac{16}{\beta^4} \alpha_{mnII}$$

$$\alpha_{mnII} = \frac{3.263 C_m C_n}{r_m + r_n} \left(\right)$$

$$\left(e^{-1.74 R_0 (r_m + r_n)} - e^{-R_0 (r_m + r_n)} \right),$$

(aus Gl. (66) u. (66))

$$\rightarrow C_{mII}^{(1)}(t \rightarrow \infty) = \frac{i \alpha_{mnII} \pi \omega_{mn}}{52.8 \beta} \times \downarrow$$

$$\times \cos(2\omega_{mn} \sqrt{1}) \frac{e^{-\frac{\omega \sqrt{1+2}}{\beta^3}} \sqrt{1+r_0^2}}{(6+r_0^2)} \quad \text{--- (80)}$$

r_0	$\left\{ \sqrt{1+2} / \sqrt{1+2} \right\}^2$	$\sqrt{1+r_0^2} \sqrt{6+r_0^2} \times 1.65$
0	1.0	1.48
1/2	1.50	1.60
1	2.21	2.266
2	4.49	4.284
3	7.84	7.416
4	12.50	11.78
5	18.49	17.21
7	34.55	31.80

Tabelle (4)₁

Um $C_{mII}^2(t \rightarrow \infty)$ in einer Beziehung mit $C_{mII}^1(t \rightarrow \infty)$ zu bekommen, verfahren wir folgendes:

$$i C_{mII}^{(2)}(t \rightarrow \infty) = \sum_k V_{km}(t) e^{i\omega_{mn}t} \chi_k^{(1)} C_k^{(1)}(t \rightarrow \infty)$$

$$\text{Für } k=n: \rightarrow C_{mII}^{(2)}(t \rightarrow \infty) = -i C_n^{(1)}(t \rightarrow \infty) \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{II}(t) dt \cdot \dot{\alpha}_{mnII}$$

Aus (81)₁ und der Gl. für $C_{mII}^{(1)}$ nämlich (73), folgern wir:-

$$\begin{aligned} \dot{\alpha}_{mnII} \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{II}(t) dt &= \frac{-\pi e^{\frac{-\omega_{mn}\sqrt{1+\beta^2}}{2}} \sqrt{1+\beta_0^2} \cos(2\omega_{mn}\sqrt{-1}) \omega_{mn} \alpha_{mnII}}{(52.8\beta)(\epsilon + \beta_0^2)} \\ \rightarrow C_{mII}^{(2)} &= -\frac{\alpha_{mnII}^2 \omega_{mn}^2 \pi^2 e^{-2\omega_{mn}\sqrt{1+\beta^2}} \cos^2(2\omega_{mn}\sqrt{-1})(1+\beta_0^2)}{52.8\beta(\epsilon + \beta_0^2)} = \\ &= [C_{mII}^{(1)}]^2 \end{aligned} \quad \text{--- (81)}$$

$$\rightarrow C_{mII} = C_{mII}^{(2)} + [C_{mII}^{(2)}]^2 + \dots \approx C_{mII}^{(1)}; \rightarrow \text{analog: } C_{mI} \approx C_{mI}^{(1)}$$

$$\rightarrow C_m \equiv C(t \rightarrow \infty) = C_{n \rightarrow mI}^{(1)}(t \rightarrow \infty) + C_{n \rightarrow mII}^{(1)}(t \rightarrow \infty) \quad \text{--- (82)}$$

Addieren wir beide Übergangsamplituden C_{mI} und C_{mII} aus Gl.

(71) und (80)₁, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} C_m(t \rightarrow \infty) &= \frac{-i\alpha_{mn} \pi \omega_{mn}}{\sqrt{1+\beta_0^2} e^{\omega_{mn}\sqrt{1+\beta^2}}} \left[\left(\sqrt{-1} \cos(\omega_{mn}\sqrt{-1}) + \sqrt{1+\beta^2} \sin(\omega_{mn}\sqrt{-1}) \right) \right] \overset{\sim}{\alpha}_{mnI} \\ &+ \frac{i\alpha_{mnII} \pi \omega_{mn} \sqrt{1+\beta_0^2}}{52.8\beta(\epsilon + \beta_0^2) e^{\omega_{mn}\sqrt{1+\beta^2}}} \left\{ \cos(\omega_{mn}\sqrt{-1}) \right\} \overset{\sim}{\alpha}_{mnII} \quad \text{--- (82)}_1 \end{aligned}$$

Für weitere Vereinfachung werden wir folgende Ausdrücke:

In einem Zusammenhang miteinander bringen. (das werden wir auf die nächste Seite behandeln)

wir möchten nun wie schon erwähnt wurde einen Zusammenhang zwischen:

a) $\sqrt{+2}$ und $\sqrt{+1}$

b) $\sqrt{-2}$ und $\sqrt{-1}$

c) $\sqrt{\pm 1}$ und β , v

wie man aus den nebenstehenden

Tabellen:

a) $\sqrt{+2} \cong 1.25\sqrt{+1} \dots (83)$

wobei: $\sqrt{\pm 2} = \sqrt{\beta + r_0^2} \pm r_0 / \beta$

$\sqrt{\pm 1} = \sqrt{1 + r_0^2} \pm r_0$

(für sehr kleine E_{st} -bzw.

große r_0 - wird: $\sqrt{+1} \cong \sqrt{+2} \dots (83)$

b) $\sqrt{-2} \cong 2\sqrt{-1} \dots (84)$

↳

$\cos(\omega_{mn}\sqrt{-2}) \cong \cos(2\omega_{mn}\sqrt{-1})$
 $= 1 - \sin^2(\omega_{mn}\sqrt{-1})$

c) Aus (44)₂ erhielten wir:

$\beta = 6v^2/\sqrt{r_0^2}$

d.h. $\sqrt{+1} = \left\{ (1+r_0^2)^{1/2} + r_0 \right\} \frac{1/2 \sqrt{r_0^2}}{.775v}$

$\Rightarrow \sqrt{+1} \cdot .775v = \sqrt{1+r_0^2} + r_0 \dots (84)$

Aus der Tabelle (5)₂ erhalten

wir für $\sqrt{-1}$: $\sqrt{-1} = .774/v \dots (84)$

Für sehr kleine E_{st} -bzw.

große r_0 - erhalten wir dann:

$\sqrt{-1} = \frac{.4}{.775v} = \frac{2}{3}\sqrt{-1} \dots (84)$

r_0	$\sqrt{+2} \sqrt{\beta}$	$\sqrt{+1} \sqrt{\beta}$	$\frac{\sqrt{+2} \times}{1.25 \sqrt{+1}}$
0	1.562	1.0	1.25
1/2	1.732	1.455	1.818
1	1.908	1.554	1.94
2	2.272	2.058	2.24
3	2.62	2.482	2.55
4	2.948	2.203	2.826
5	3.251	2.47	3.09
7	3.79	3.75	3.55

Tabelle (5)

r_0			
0	1.562	1.0	2.0
1/2	1.414	0.78	1.56
1	1.283	0.643	1.286
2	1.078	0.486	0.972
3	0.933	0.403	0.806
4	0.836	0.351	0.702
5	0.754	0.316	0.632
7	0.645	0.265	0.530

Tabelle (5)₁

r_0		$\sqrt{-1} \cdot .775v$
1/4	0.8	0.68
1/2	0.068	0.658
1	1.554	0.643
2	2.14	0.57
3	2.68	0.53
4	3.20	0.49
5	3.692	0.47
6		0.45

Tabelle (5)₂

$\Rightarrow \sqrt{+1} \cdot .775v \cong .60$

Aus der Tabelle (5) schreiben wir die Beziehung:

$$\sqrt{+1} = \frac{0.72(1+r_0)}{0.775v} = \frac{0.93}{v}(1+r_0). \quad \text{--- (85)}$$

Nun nimmt Gl. (82)₁ für $C_m(t \rightarrow \infty)$ auf Grund Formel (83), (84) und (85), folgende Gestalt an:

$$C_m^{(1)}(t \rightarrow \infty) = \frac{-1\pi \alpha_{mn} e^{-\omega_{mn}\sqrt{+1}}}{\sqrt{1+p_0^2}} \left\{ \frac{.774}{v} \cos\left(\frac{.774 \omega_{mn}}{v}\right) + \frac{.93(1+p_0)}{v} \sin\left(\frac{.774 \omega_{mn}}{v}\right) \right. \\ \left. + \frac{i\pi \alpha_{mn} \omega_{mn} e^{-\omega_{mn} 1.25\sqrt{+1}}}{52.8\beta(6+p_0^2)(1+p_0^2)-1/2} \left(\cos\left\{2\omega_{mn} \chi \cdot \frac{.774}{v}\right\} \right)^{2u} \right\} \quad (82)_2$$

Und mit Formel (85): erhalten wir für $|C_m^{(1)}|^2$ folgende Formel:

$$|C_m^{(1)}(t \rightarrow \infty)|^2 = \frac{\pi^2 \alpha_{mn}^2}{1+p_0^2} e^{-1.86 \omega_{mn}(1+p_0)/v} \left\{ \frac{.6}{v^2} \cos^2 u + \frac{.865(1+p_0)^2}{v^2} \sin^2 u + \right. \\ \left. \frac{1.44(1+p_0) \cos u \sin u}{v^2} \right\} + \frac{\pi^2 \alpha_{mn}^2 (1+p_0^2) p_0 e^{-\frac{2.325 \omega_{mn}}{v} (1+p_0)}}{(6+p_0^2)^2 (52.8)^2 \chi \cdot 36 v^4} \\ - \frac{2\pi^2 \alpha_{mn} \alpha_{mn} e^{-\frac{2.0925 \omega_{mn}}{v} (1+p_0)}}{52.8(6+p_0^2) \chi \cdot 6 v^2} \left\{ \frac{.774}{v} \cos(2u) \cos u + \right. \\ \left. \frac{.93(1+p_0) \cos(2u) \sin u}{v} \right\} \quad \text{--- (86)}$$

($\beta = .6v^2/\sqrt{p_0}$ mit p_0 kann sehr klein, aber nicht Null, sein)

$$|C_m^{(1)}(t \rightarrow \infty)|^2 \equiv |C_1|^2 + |C_2|^2 + |C_3|^2 \quad \text{--- (86)}_1$$

Der Streuquerschnitt $Q_{n \rightarrow m}(E_{st})$ wird gerechnet nach d. Formel:

$$Q_{n \rightarrow m}(E_{st}) = 2\pi \int_0^\infty |C_m(t \rightarrow \infty)|^2 B dB \quad \text{--- (87)}$$

und setzt sich aus Q_1, Q_2 , u. Q_3 , wie folgt, zusammen:

$$Q_1 = 2\pi \int_0^\infty |C_1|^2 B dB \quad \text{--- (87)}_1$$

$$\varphi_2 = 2 \pi \int_0^{\infty} |C_2|^2 B dB \quad \text{--- --- --- (87)}_2$$

$|C_2|^2$ ist aus dem 2. Glied von Gl. (86) zu bekommen.

$|C_2|^2$ ist äquivalent dem 2. Glied von Gl. (86).

$$\varphi_3 = 2 \pi \int_0^{\infty} |C_3|^2 B dB \quad \text{--- --- --- (87)}_3$$

$|C_3|^2$ ist aus dem 3. Glied von Gl. (86) zu erhalten,

$|C_3|^2$ ist äquivalent dem 3. Glied von Gl. (86) * *

In der Formel (87) stehen drei verschiedene Funktionen, nämlich:

$$\varphi = \varphi(E_{st}, E_{n \rightarrow m})$$

$$C = C(E_{st}, r_0, E_{n \rightarrow m})$$

$$B = B(E_{st}, r_0)$$

deshalb ist es besser und angenehmer beim Durchführen den Integrationen daß wir B durch r_0 und E_{st} bzw. $B dB$ durch eine Funktion von r_0 und E_{st} multipliziert mit dr_0 in der Formel (87) bzw. (87)₁, (87)₂ und (87)₃ ersetzen.

Diese Behandlung (das Ersetzen von $B dB$ durch $r_0 dr_0$) wird auf nächste Seite (45) durchgeführt.

VII Berechnung des Wirkungsquerschnittes (im disk. Sp.)

1. Das Ersetzen von B durch r_0 und E_{st} und dB durch dr_0

Aus der Gl.:

$$1 = \frac{B^2}{r_0^2} + \frac{\alpha_0}{1 + r_0^2} \quad \text{erhalten}$$

wir (nach B aufgelöst):

$$B = r_0 \sqrt{1 - \alpha_0 / (1 + r_0^2)}^{1/2}$$

$$\left. \begin{aligned} B=0 &\rightarrow r_0 = \sqrt{\alpha_0 - 1} \\ B=\infty &\rightarrow r_0 = \infty \end{aligned} \right\} \quad (88)$$

Wir differenzieren die obige Gl. nach r_0 :

$$\rightarrow B dB = \left(r_0 - \frac{\alpha_0 r_0}{1 + r_0^2} + \frac{\alpha_0 r_0^3}{(1 + r_0^2)^2} \right) dr_0 \quad (89)$$

Wenn wir diese Gl. (89) für BdB in Gl. (87) einsetzen, finden wir dann solchen Integrant vor, wo die Integration sehr kompliziert wird. Deshalb wenden wir uns einer anderen gut genäherten Formel für BdB zu, die viel einfacher ist und die von der genauen Formel (89) durchschnittlich gar nicht viel unterscheidet. (sehr geringe Abweichung)

Das wird mit Hilfe der Tabelle durchgeführt. (Tab. 6) Dazu machen wir folgenden Ansatz für r_0 :

$B_{\text{näh.}}$	α_0	$B_{\text{genau.}}$	r_0	$E_{st}(\text{e.V.})$
1/2	1	0.32	0.61	26.6
	2			13.3
	3	0.507	1.538	
	4			
	5			
	6	0.600	2.348	4.3
1	1	0.943	1.22	
	2	0.95	1.515	
	3			
	4			
	5			
	6	0.998	2.482	
2	1	2.205	2.44	
	2			
	3	2.00	2.57	
	4			
	5			
	6	1.903	3.007	
3	1	3.53	3.66	
	2		3.51	
	3			
	4	2.98	3.55	
	5			
	6	2.80	3.71	
	7	2.817	3.805	3.80

Tabelle (6)

Ein Wert (z. B. 1) für B wird in die obige Gl. ($1 = B^2 / r_0^2 + \alpha_0 / (1 + r_0^2)$) eingesetzt und daraus bestimmen wir r_0 für bestimmte E_{st} bzw. α_0 . Diese (genauen) Werte von r_0 , α_0 setzen wir in die genäherte Beziehung (90)₂ und berechnen wir daraus $B_{\text{näh.}}$ um die Richtigkeit von der Bez. (90)₂ zu prüfen.

$$r_0 = l_0 \{ B^l / \alpha_0^{l_1} + l_2 (\alpha_0 - l_3) \}^{1/2} \quad \text{----- (90)}$$

$\leadsto r_0^2 = l_0^2 (B^l / \alpha_0^{l_1} + l_2 (\alpha_0 - l_3))$, und dann nach B differenziert: $r_0 dr_0 = l_0^2 l B^{l-1} \alpha_0^{-l_1} dB$

Also es wird am günstigsten, wenn wir von vorneherein-

$l = 2$ setzen:

$$\leadsto r_0 dr_0 = (l_0^2 \alpha_0^{-l_1}) B dB$$

$$\leadsto d.h. B dB = (\alpha_0^{l_1} / l_0^2) r_0 dr_0 \quad \text{----- (91)}$$

Außerdem erhalten wir für $B = 0$: $r_0 = l_0 \sqrt{l_2 (\alpha_0 - l_3)}$,

und nach (88) wird: $r_0 = \sqrt{\alpha_0 - 1}$

deshalb ist es recht angenehm, wenn wir: $l_3 = 1$ setzen;

das liefert: $r_0 = \text{konst. } (\alpha_0 - 1)^{1/2}$.

Also für $B = 0$, je $l_0^2 l_2$ zu 1 näher wird, um so genauer unserer Ansatz wird.

Wir setzen also in (90); für r_0 : $l = 2$ und $l_3 = 1$ ein; -

$$r_0 = l_0 \sqrt{B^2 \alpha_0^{-l_1} + l_2 (\alpha_0 - 1)} \quad (90)_1$$

um l_0 , l_1 und l_2 zu bestimmen, lösen wir folgende drei Gl.en

(90)₁ nämlich:

	r_0	B	α_0
$r_{0I} = l_0 \sqrt{B_1^2 \alpha_{0I}^{-l_1} + l_2 (\alpha_{0I} - 1)}$	2.48	1	6
$r_{0II} = l_0 \sqrt{B_{II}^2 \alpha_{0II}^{-l_1} + l_2 (\alpha_{0II} - 1)}$	2.57	2	3
$r_{0III} = l_0 \sqrt{B_{III}^2 \alpha_{0III}^{-l_1} + l_2 (\alpha_{0III} - 1)}$	3.55	3	4

Daraus bekommen wir $l_0 = 1.22$, $l_1 = 1/4$, $l_2 = 0.7$

und (90)₁ setzen wir diese Werte von l_0 , l_1 und l_2 ein:

$$\leadsto r_0 = 1.22 \sqrt{B^2 \alpha_0^{-1/4} + 0.7 (\alpha_0 - 1)} \quad \text{----- (90)_2}$$

$$\text{wobei } l_0^2 l_2 = 1.488 \times 0.7 = 1.04 \approx 1$$

also für (z.B.) $B = 0$ erhalten wir:

$$r_0 = 1.04 (-1)^{1/2} \quad (-1)^{1/2}, \text{ d.h. der genaue Wert.}$$

Gl. (91) nimmt nun die Form:

$$\text{BdB} = -\frac{(\alpha_0)^{1/4}}{(1.22)^2} r_0 dr_0$$

oder

$$\text{BdB} = 0.672(\alpha_0)^{1/4} r_0 dr_0 \quad \dots\dots\dots (91)_1$$

2. Berechnung von ψ_1 , ψ_2 , ψ_3 und anschließend Q

$$(\psi = \psi_1 + \psi_2 + \psi_3)$$

a) wir berechnen ψ_1 :

Wir setzen die Beziehung (91)₁ in Gl. (87)₁ ein, um ψ_1 zu berechnen:

$$\begin{aligned} Q_1 &= 2\pi \int_{\sqrt{\alpha_0-1}}^{\infty} \pi^2 \alpha_{mn1} \frac{e^{-1.86\omega_{mn}(1+\eta_0)/v}}{1+\eta_0^2} \alpha_0^{1/4} \left(\frac{.6 \cos^2 u + .865 \sin^2 u (1+\eta_0)^2}{v^2} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1.44(1+\eta_0) \cos u \sin u}{v^2} \right) d\eta_0 \\ &= \overbrace{2\pi^3 \alpha_{mn1}^2}^{K_{mn1}''} \frac{1}{3v^2} \alpha_0^{1/4} \left[\int_{\sqrt{\alpha_0-1}}^{\infty} e^{-1.86(1+\eta_0)\omega_{mn}/v} \left(\frac{.6 \cos^2(u) + .865 \sin^2 u (1+\eta_0)^2}{1} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 1.44(1+\eta_0) \cos u \sin u \right) d\eta_0 \right] \\ &= \overbrace{K_{mn1}''}^{} \int_{\sqrt{\alpha_0-1}}^{\infty} e^{-1.86\omega_{mn}(1+\eta_0)/v} \left(.6 \cos^2 u + .865 \sin^2 u + 1.44 \cos u \sin u \right) d\eta_0 \quad L_{mn11} \\ &\quad + \eta_0 \left(1.73 \sin^2 u + 1.44 \cos u \sin u \right) + \eta_0^2 \times .865 \sin^2 u \quad M_{mn1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \rightarrow Q_1 &= K_{mn1} \left\{ L_{mn1} e^{\frac{-1.86 \omega_{mn} (1+r_0)^{1/2}}{1.86 \omega_{mn} / v}} + \frac{M_{mn1}}{(1.86 \omega_{mn} / v)^2} \left(1 + \frac{1.86 \omega_{mn} \sqrt{\alpha_0 - 1}}{v} \right) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{.865 \sin^2 u}{(1.86 \omega_{mn} / v)^2} e^{\frac{-1.86 \omega_{mn} \sqrt{\alpha_0 - 1}}{v}} \left(\alpha_0 - 1 + \frac{2 \sqrt{\alpha_0 - 1}}{1.86 \omega_{mn} / v} + \frac{2}{(1.86 \omega_{mn} / v)^2} \right) \right\} \quad (92) \\
 &= K_{mn1} \frac{e^{\frac{-1.86 \omega_{mn} \sqrt{\alpha_0 - 1}}{v}}}{(1.86 \omega_{mn} / v)} \sin u \left\{ L_{mn1} + \frac{M_{mn1}}{1.86 \omega_{mn} / v} \left(1 + \frac{1.86 \omega_{mn} \sqrt{\alpha_0 - 1}}{v} \right) \right. \\
 &\quad \left. + .865 \sin^2 u \left(\alpha_0 - 1 + \frac{2 \sqrt{\alpha_0 - 1}}{1.86 \omega_{mn} / v} + \frac{2}{(1.86 \omega_{mn} / v)^2} \right) \right\} \quad (92)_4 \\
 &\quad \text{(mit } a_1 \equiv 1.86 \omega_{mn} / v = 240.25 \omega_{mn} / \sqrt{E_{st}}; \quad u \equiv 100.05 \frac{\omega_{mn}}{\sqrt{E_{st}}})
 \end{aligned}$$

$$\rightarrow Q_1 = K_{mn1} \left\{ L_{mn1} + M_{mn1} (a_1^{-1} + \sqrt{\alpha_0 - 1}) + .865 \sin^2 u \left(\alpha_0 - 1 + \frac{2 \sqrt{\alpha_0 - 1}}{a_1} + \frac{2}{a_1^2} \right) \right\} \quad (92)_2$$

$$\left. \begin{aligned}
 \text{wobei: } K_{mn1} &= 1932.5 a_1^{-1} \alpha_{mn1}^2 e^{\frac{-a_1 (1 + \sqrt{\alpha_0 - 1})}{E_{st}}} / E_{st}^{5/4} \\
 L_{mn1} &= .6 \cos^2 u + .865 \sin^2 u + 1.44 \sin u \cos u \\
 M_{mn1} &= 1.73 \sin^2 u + 1.44 \cos u \sin u \quad \text{ sind.}
 \end{aligned} \right\} \quad (92)_3$$

b) Q_2 zu berechnen: (zum 2. Pot. topf.)

Beim Einsetzen von Gl. (91)₁ in Gl. (87)₂ erhalten wir folgende Gleichung für Q_2 , die sich auf den zweiten Potentialtopf bezieht:

$$Q_2 = \frac{2 \pi \alpha_{mn1}^2 \omega_{mn}^2}{.36 v^{-4} \times (52.8)^2} \int_{\sqrt{\alpha_0 - 1}}^{\infty} \frac{e^{-2.235 \omega_{mn} (1+r_0)/v}}{\chi \cos^2(u/2)} \times \frac{1/4}{(6 + r_0^2)^2} \alpha_0^{1/2} (1 + r_0^2) \frac{dr_0}{r_0} \quad (93)$$

In dieser Gl. (93) sehen wir den Bruch $(1 + r_0^2) / (6 + r_0^2)^2$, der zu einer sehr komplizierten Integration führt, deshalb suchen wir eine andere zu diesem Bruch äquivalente Funktion von r_0 . Dafür machen wir folgenden Ansatz:

$$\frac{1 + r_0^2}{(6 + r_0^2)^2} = (1/22)e^{-.12r_0}$$

Diese Äquivalenz haben wir mit Hilfe der Tabelle (7) aus dem Ansatz:

$$A = ae^{-br_0} = (1 + r_0^2)/(6 + r_0^2)^2$$

Aus der Tabelle (7) ersehen wir, daß $a = 1/22$, $b = 0.12$.

Aus der dritten und zweiten Kolumne ersehen wir, daß für den wichtigen Bereich -wo $r_0 = 1$ bis 5- die zweite Kolumne genauer passt; deshalb ziehen wir den Wert $a = 1/22$ nicht sondern $a = 1/21$ vor.

Für unsere Q_2 -Berechnung benutzen wir für den Bruch $(1 + r_0^2)/(6 + r_0^2)^2$ die Funktion $-\frac{1}{21}x e^{-.12r_0}$.

r_0	$\frac{1+r^2}{(6+r^2)^2}$	$e^{-.12r_0}/21$	$e^{-.12r_0}/22$
1/4	1/34.5	1/22	1/23
1/2	1/31.6	1/22.6	1/24
1	1/24.5	1/23.6	1/24.6
2	1/20	1/26.67	1/27
3	1/22.5	1/30	1/31
4	1/28.5	1/33.8	1/35
5	1/37	1/38	1/40
6	1/47.67	1/43	1/45
7	1/60.5	1/50	1/54
8	1/75.4	1/60	1/61

Tabelle (7)

$$\begin{aligned}
 \rightarrow Q_2 &= \frac{\pi \alpha_{mn11}^3 \omega_{mn}^2 \cos^2(2u) (676)}{3.78 \nu^4 (528)^2} \alpha_0 \frac{1/4 \int_0^\infty e^{-2.325 \omega_{mn} / \nu} - r_0 (12 + \frac{2.325 \omega_{mn}}{\nu}) \times r_0^2 / \alpha_0}{\sqrt{\alpha_0 - 1}} \\
 &= \frac{\int_0^\infty \cos^2(2u) K_{mn2}}{3.78 \nu^4 (528)^2} \alpha_0 \frac{1/4 \int_0^\infty e^{-2.325 \omega_{mn} / \nu} - r_0 a_2}{\sqrt{\alpha_0 - 1}} \int_0^\infty e^{-r_0 a_2} r_0^2 dr_0 \\
 &= K_{mn2} \frac{e^{-a_2 \sqrt{\alpha_0 - 1}}}{a_2} \left(\alpha_0 - 1 + \frac{2 \sqrt{\alpha_0 - 1}}{a_2} + \frac{2}{a_2^2} \right) \quad \text{--- (93)}
 \end{aligned}$$

$$\rightarrow Q_2 = K_{mn2} e^{\frac{-(12 + 2 \cdot 325 \frac{\omega_{mn}}{\pi}) \sqrt{\alpha_0 - 1}}{\chi} - \frac{2 \cdot 325 \frac{\omega_{mn}}{\pi}}{\chi}} = \frac{2}{a_2^3} \quad (93)_1$$

$$= K_{mn2} e^{\frac{-(12 + 300.33 \frac{\omega_{mn}}{E_{st}}) \sqrt{\alpha_0 - 1}}{\chi \cos^2(2u)} + \frac{2 \sqrt{\alpha_0 - 1}}{a_2^2} + \frac{2}{a_2^3}} \quad (93)_1$$

wobei: $a_2 \equiv 12 + \frac{300.33 \omega_{mn}}{\sqrt{E_{st}}}$ und mit:

$$L_{mn2} = \cos^2(2u) e^{\frac{-a_2 \sqrt{\alpha_0 - 1}}{\chi}} \quad \text{; ist aus (93) zu kriegen} \quad (93)_2$$

$$M_{mn2} = \frac{\alpha_0 - 1}{a_2} + \frac{2 \sqrt{\alpha_0 - 1}}{a_2^2} + \frac{2}{a_2^3}, \text{ erhalten wir die Abkürzung:}$$

$$\rightarrow Q_2 = K_{mn2} L_{mn2} M_{mn2} \quad (93)_{1,2}$$

c) Q_3 zu berechnen (zur Kopplung beider Pot. töpfe.): -

Analog zu der Berechnung von Q_2

setzen wir die Beziehung (91)₁

in (87)₃ um Q_3 zu berechnen

(und zwar in Bezug auf r_0 statt

B). Wir sehen dann Q_3 in der

Gestalt:

$$Q_3 = 2\pi \int_{\sqrt{\alpha_0 - 1}}^{\infty} \frac{\pi^2 \alpha_{mn1} \alpha_{mn2} \alpha_{mn3} r_0^{1/2} r_0^{1/4} \alpha_0 \chi_2}{(52.8)(6+r_0) \chi \cdot 6 v^2} e^{-2.0925 \frac{\omega_{mn}}{\chi} v^{-1} (1+r_0)} \chi_2$$

$$\left(774 v^2 \cos(2u) \cos u + \frac{93}{v} (1+r_0) \cos(2u) \sin u \right) d r_0;$$

r_0	$r_0^{1/2} (6+r_0)^{-1}$	$e^{-1.34-58 r_0}$
1/4	1/3.03	1/4.39
1/2	1/4.375	1/5.05
1	1/7.0	1/6.69
2	1/14.14	1/11.71
3	1/25.98	1/20.5
4	1/44.0	1/35.9
5	1/69.3	1/63.0
6	1/103	1/110
7	1/145.5	1/190
8	1/200	1/333
∞	0	0

Wir sehen in der rechten Seite

Tabelle (8)

der Gleichung die Funktion

$1/(r_0)^{1/2} (6+r_0)$. Wir ersetzen diese Funktion -für die Erleichterung der Integration- durch andere Funktion und zwar durch den Ansatz:

$$A(r_0) = 1/(r_0)^{1/2} (6 + r_0^2) = a \cdot r_0 \cdot e^{-b - cr_0}$$

Aus der Tabelle (d) ersenen wir, das die günstigen Werte für a, b und c sind:

$$a = 1 \quad b = 1.34 \quad c = .56$$

wir ersetzen also die Funktion $A(r_0) = r_0 \cdot e^{-1.34 - .56 \cdot r_0}$ statt $1/(r_0)^{-1/2} \cdot (6 + r_0^2)$, damit erhalten wir:

$$\begin{aligned} & \xrightarrow{\text{---} K'_{mn3} \text{---}} \\ & \rightarrow Q_3 = -2\pi \cdot 6.72 \cdot \alpha_0 \cdot X_{mn3} X_{mn3} \omega_{mn3} \in X_2 \\ & \int_{\sqrt{\alpha_0-1}}^{\infty} r_0^{2.0925 \omega_{mn3}/r_0 + .56} \left(\frac{7.74}{r_0} \cos u + \frac{2.3}{r_0} \sin u \right) \cos(2u) + \\ & \quad L_{mn3} + \frac{9.3 r_0}{r_0^2} \cos(2u) \sin u \Big|_{M_{mn3}} d r_0 \\ & = -K'_{mn3} \int_{\sqrt{\alpha_0-1}}^{\infty} L_{mn3} r_0^2 e^{-a_3 r_0} d r_0 + \int_{\sqrt{\alpha_0-1}}^{\infty} \frac{9.3}{r_0} \cos(2u) \sin u r_0^3 e^{-a_3 r_0} d r_0 \\ & = +K'_{mn3} \left\{ e^{-a_3 \sqrt{\alpha_0-1}} \left(\frac{\alpha_0-1}{a_3} + \frac{2\sqrt{\alpha_0-1}}{a_3^2} + \frac{2}{a_3^3} \right) L_{mn3} + \right. \\ & \quad \left. + e^{-a_3 \sqrt{\alpha_0-1}} \left(\frac{(\alpha_0-1)^{3/2}}{a_3} + \frac{3(\alpha_0-1)}{a_3^2} + \frac{6\sqrt{\alpha_0-1}}{a_3^3} + 6/a_3^4 \right) M_{mn3} \right\} \quad (94) \end{aligned}$$

$$\rightarrow Q_3 = K_{mn3} (L_{mn3} l_3 + M_{mn3} m_3) \quad (94)_1$$

$$\begin{aligned} \text{wobei } K_{mn3} &= K'_{mn3} X e^{-a_3 \sqrt{\alpha_0-1}} = 24.971 X e^{-\sqrt{E_{st}} \omega_{mn3} \alpha_{mn3} X_{mn3}} \\ a_3 &= 270.29 \omega_{mn3} / \sqrt{E_{st}} + .56 \quad ; u = 100.05 \omega_{mn3} / \sqrt{E_{st}} \\ M_{mn3} &= (120.1 / \sqrt{E_{st}}) \sin u \cos(2u) \\ L_{mn3} &= \frac{100.05}{\sqrt{E_{st}}} (\cos u + 1.2 \sin u) \cos(2u) \\ l_3 \text{ und } m_3 &\text{ sind ausd. Gl. (94) zu kriegen!} \end{aligned} \quad (94)_2$$

Nun schreiben wir die Gl. für Q_1, Q_2 u. Q_3 aus (92)₂, (93)_{2,1} (94)₁ zusammen:

$$Q_1 = K_{mn1} \{ L_{mn1} + M_{mn1} (\bar{a}_1' + \sqrt{\alpha_0 - 1}) + .865 \sin^2 u (\alpha_0 - 1 + 2\sqrt{\alpha_0 - 1} / a_1 + 2/a_1^2) \}$$

$$Q_2 = K_{mn2} \times L_{mn2} \times M_{mn3}$$

$$Q_3 = K_{mn3} (L_{mn3} l_3 + M_{mn3} m_3)$$

Um den Wirkungsquerschnitt $\underline{Q}$ zu bekommen, summieren wir Q_1 und Q_2 und Q_3 von den Gl.en (92)₂, (93)_{2,1} und (94)₁

$$Q(E_{st}) = Q_{n \rightarrow m, 1}(E_{st}) + Q_{n \rightarrow m, 2}(E_{st}) + Q_{n \rightarrow m, 3}(E_{st})$$

VIII Die numerischen Berechnungen

1. Bestimmung der Energieterme in unserem H_2 -Potentialtopf

Setzen wir in Gl. () : $n_2 - n_1 = n' \dots n' = 1, 2, 3, \dots$

$V_1 = V_2 = 0$ ein, so nimmt sie

folgende Form an:

Wir setzen: $k_n / (2\mu V_0)^{1/2} = A_n \dots \dots \dots (95)$

Gl. (95) nimmt dann die Form:

$$\omega A_n = n\pi + 2 \arccos A_n$$

es d. Abb. (13) :

$$= 2 \arccos A_n \rightarrow \cos \frac{\varphi}{2} = A_n$$

$$a) = .945(0.2) \text{ od. } y = .945 y$$

h.

$$\omega A_n = .945(n\pi + 2 \arccos 0)$$

$$\omega A_n = .945(n+1)\pi$$

$$k_n R_\infty = .945(n+1)\pi$$

$$k_n^2 R_\infty^2 = .893(n+1)^2 \pi^2$$

(95)

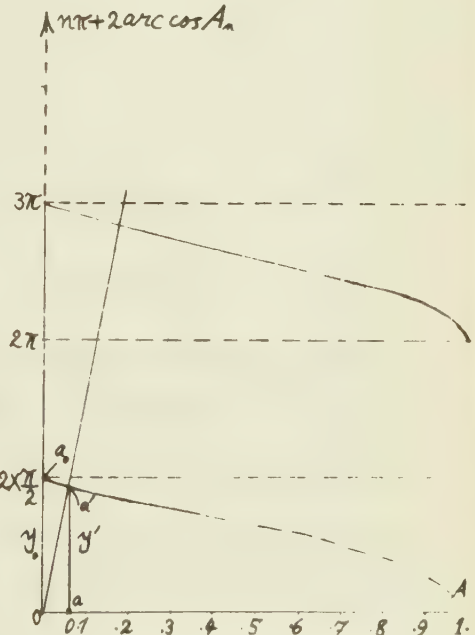
$$V_0 R_\infty^2 + \frac{E_n}{V_0} 2\mu V_0 R_\infty^2 = .893(n+1)^2 \pi^2$$

$$\frac{E_n}{V_0} = \frac{.893(n+1)^2 \pi^2}{2\mu V_0 R_\infty^2} - 1 = \frac{.893(n+1)^2}{N^2} - 1$$

Abb. (13)

$$E_n = V_0 \left(\frac{.893(n+1)^2}{N^2} - 1 \right) \quad \text{u.} \quad E_{n+1} = V_0 \left(\frac{.893(n+2)^2}{N^2} - 1 \right) \quad (95)$$

$$E_{n+1} - E_n = .893 V_0 \frac{2n+3}{N^2} \quad (V_0 = 4.78 \text{ ev.; } N = 15; n = 0, 1, 4) \dots \dots \dots$$



Nach dieser Formel (95)₂ erhalten wir, für $V_0 = 4.8 \text{ e.V.}$:

$$(E_{n+1} - E_n) = 4.055 \text{ e.V.},$$

oder nach der Formel bei der Arbeit von Herrn Prof. Großmann, nämlich nach der Formel:

$$E_{n+1} - E_n = (2n + 5) V_0 / N^2$$

erhalten wir: $(E_{n+1} - E_n) = 5.43 \text{ e.V.}$

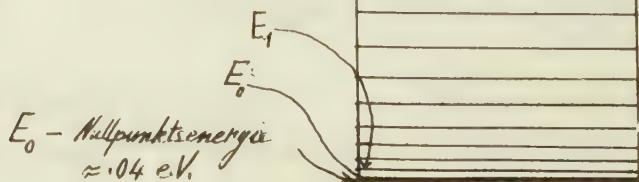
Die in der nebenstehenden Tabelle (9) aufgeschriebenen Übergänge sind nach der Formel (95)₂, (und mit $V_0 = 4.70 \text{ e.V.}$) gerechnet.

$E_n \rightarrow E_m = E_{n-m}$ $m = n \pm 1$	e.V.	$E_{n,m}$	e.V.
14 zu kont.	0.5	5 zu 6	0.245
13 zu 14	0.546	4 zu 5	0.207
12 zu 13	0.5088	3 zu 4	0.17
11 zu 12	0.4717	2 zu 3	0.1318
10 zu 11	0.4350	1 zu 2	0.0938
9 zu 10	0.3985	0 zu 1	0.0560
8 zu 9	0.3624	zu 0	0.04
7 zu 8	0.326		
6 zu 7	0.2903		

Tabelle (9)

Abb.(7) zeigt den Potentialtopf des H_2 -Mol. und wenn beide H.-Kerne des H_2 -Mol. z. hängen. Nach diesem Topf-Modell nehmen sich die Teilnabstände immer wieder von unten nach oben zu. Beim (wirklichen) H_2 -Mol. ist der Fall umgekehrt.

Abb.(9) →
(ist nachd.
Tab.(9) gezeichnet)



2. Die in Q_1 , Q_2 und Q_3 stehenden Übergangsfunktionen

Diese Übergangsfunktionen sind: $\alpha_{mnI}, \alpha_{mnII}$

$$\omega_{mn}, b_m b_n,$$

Unsere Wirkungsquerschnitte (im disk. Sp.) werden für folgende (6) gewählte Übergänge, nämlich:

$$0 \rightarrow 1, \quad 0 \rightarrow 7, \quad 0 \rightarrow 14, \quad 0 \rightarrow E_m = (-1/625) \text{ e.V.}$$

$$7 \rightarrow 14, \quad 14 \rightarrow E_m = (-1/625) \text{ e.V.} \quad \cancel{14 \rightarrow E_m = (-1/625) \text{ e.V.}}$$

berechnet, die als Funktionen der Stoßenergien (E_{st}) für die Serie von 1, 2, ..., 10, 12, ..., 22 e.V. bestimmt werden.

Zunächst müssen wir folgende Übergangsfunktionen $\alpha_{mnI}^2, \alpha_{mnII}^2, \alpha_{mnI}^2$ nach den Formeln (65)₁ und (66)₁ für jeden einzelnen Übergang bestimmen; wobei:

$$\alpha_{mnI} = \frac{26.5}{27.21} \frac{k_m k_n R_0^2}{\omega^2 (l_m + l_n)}$$

$$\alpha_{mnII} = \frac{7.18 C_m C_n}{l_m + l_n} e^{\frac{-R_0(l_m + l_n)}{R_0}} \left\{ -1 + e^{\frac{-71 R_0(l_m + l_n)}{R_0}} \right\} = \frac{7.18 b_m b_n}{l_m + l_n} \frac{k_m k_n R_0^2}{\omega^2} \left\{ 1 + e^{\frac{-71 R_0(l_m + l_n)}{R_0}} \right\}$$

wobei $\omega^2 = (15\pi)^2 \frac{k_m l_m}{l_m + l_n} \frac{k_n l_n}{l_m + l_n}$ nach den Formeln (64) zu berechnen.

Da der Term $\exp\{-71(l_m + l_n)R_0\} \approx 0$, wobei er in Maximum = 10^{-5}

ist, können wir α_{mnII} folgendes schreiben:

$$\alpha_{mnII} = \frac{7.18 b_m b_n k_m k_n R_0^2}{(l_m + l_n) \omega^2}$$

$$\rightarrow \alpha_{mnII} = 7.37 \alpha_{mnI} \rightarrow \alpha_{mnII}^2 = 54.32 \alpha_{mnI}^2$$

$$u. \alpha_{mnI}, \alpha_{mnII} = 7.37 \alpha_{mnI}^2$$

Auf der nächsten Seite ist eine Tabelle fertig gerechnet für die schon erwähnten Übergangsfunktionen.

Tabelle für die Übergangsfunktionen (für die sieben Übergänge)

$n \rightarrow m$	ω_{mn}/v	$\ell_m \ell_n$	α_{mn}^2	$\alpha_{mn} \alpha_{mnj}$	α_{mn}^2
$0 \rightarrow -1$ $\frac{.205}{17/2}$ $\frac{.1}{.5t}$	.750	$(2.545 \Delta 10^{-4})^2$	$-5.505 \Delta 10^{-7}$	$3.91 \Delta 10^0$	
$0 \rightarrow -7$ $\frac{2.190}{17/2}$ $\frac{.1}{.5t}$	.7473	$(10^2)^2$	$-7.57 \Delta 10^0$	$5.432 \Delta 10^5$	
$0 \rightarrow -14$ $\frac{20.043}{17/2}$ $\frac{.1}{.5t}$	.7343	$(2.551 \Delta 10^2)^2$	$-5.102 \Delta 10^3$	$3.70 \Delta 10^4$	
$0 \rightarrow -m$ $\frac{22.405}{17/2}$ $\frac{.1}{.5t}$ $m=0$	.5155	$(2.497 \Delta 10^2)^2$	$-4.724 \Delta 10^3$	$3.482 \Delta 10^4$	
$7 \rightarrow -14$ $\frac{11.4}{17/2}$ $\frac{.1}{.5t}$	.7518	$(1.58 \Delta 10^2)^2$	$-1.8425 \Delta 10^3$	$1.358 \Delta 10^2$	
$14 \rightarrow -m$ $\frac{2.205}{17/2}$ $\frac{.1}{.5t}$ $m=0$	.5045	$(7.41 \Delta 10^2)^2$	$-4.08 \Delta 10^2$	.5007	
$14 \rightarrow -m$ $\frac{2.45}{17/2}$ $\frac{.1}{.5t}$ $m=0$ $\frac{1}{1/0.25}$	.5045	$(7.25 \Delta 10^2)^2$	$-3.8788 \Delta 10^2$	.280	

Tabelle (10)

Auf den nächsten Seiten werden die ψ_1, ψ_2, ψ_3 und $\psi_{n-m}(E_{st}) = \psi_1 + \psi_2 + \psi_3$ für die unabhängige Variable E_{st} für jeden einzelnen Übergang in Tabellen tabelliert.
 ψ_1, ψ_2, ψ_3 sind nach den Gl.en (92)₂, (93)₁ und (94)₁ zu kriegen:

L_{mn1}	L_{mn1}	M_{mn1}	$G_1(E)$	K_{mn1}	L_{mn2}	M_{mn2}	G_2
1.352×10^{-4}	$.90240$	3.6494	$.72745 \times 10^{-3}$	1.1349×10^{-4}	1.93826×10^{-2}	5.74×10^1	$.12630 \times 10^1$
3.34×10^{-6}	3.1455×10^{-1}	2.4664×10^{-1}	1.0952×10^{-3}	2.865×10^{-5}	1.27924×10^{-1}	5.5357×10^1	$.20874 \times 10^1$
4.11×10^{-4}	2.75×10^{-1}	1.7621×10^{-1}	1.079×10^{-3}	1.445×10^{-5}	2.453×10^{-1}	5.5675×10^1	$.179376 \times 10^1$
4.238×10^{-4}	7.5674×10^{-1}	1.6722×10^{-1}	$.994 \times 10^{-3}$	$.6855 \times 10^{-6}$	3.4288×10^{-1}	6.3204×10^1	$.148543 \times 10^1$
4.17×10^{-4}	1.05533×10^{-1}	1.48155×10^{-1}	6.922×10^{-3}	4.2357×10^{-6}	4.214×10^{-1}	5.145×10^1	$.1233 \times 10^1$
4.368×10^{-4}	7.2366×10^{-1}	1.3421×10^{-1}	$.840 \times 10^{-3}$	2.92×10^{-6}	4.8591×10^{-1}	7.33781×10^1	$.10375 \times 10^1$
3.5×10^{-4}	7.1443×10^{-1}	1.2348×10^{-1}	$.773 \times 10^{-3}$	21×10^{-6}	5.37872×10^{-1}	7.84774×10^1	$.8872 \times 10^1$
3.73×10^{-4}	1.071×10^{-1}	1.1391×10^{-1}	$.72 \times 10^{-3}$	1.579×10^{-6}	5.3215×10^{-1}	9.53269×10^1	$.768 \times 10^1$
3.1×10^{-4}	1.0584×10^{-1}	1.0818×10^{-1}	$.675 \times 10^{-3}$	$.721817 \times 10^{-6}$	6.2054×10^{-1}	8.8434×10^1	$.673 \times 10^1$
3.458×10^{-4}	6.956×10^{-1}	1.0177×10^{-1}	$.637 \times 10^{-3}$	$.7757 \times 10^{-6}$	6.5313×10^{-1}	9.32×10^1	$.59553 \times 10^1$
3.17×10^{-4}	6.8425×10^{-1}	$.9255 \times 10^{-1}$	$.573 \times 10^{-3}$	$.663 \times 10^{-6}$	7.03015×10^{-1}	10.2293×10^1	$.4785 \times 10^1$
2.964×10^{-4}	6.857×10^{-1}	8.527×10^{-1}	$.517 \times 10^{-3}$	$.4730 \times 10^{-6}$	7.5262×10^{-1}	10.775×10^1	$.37448 \times 10^1$
2.774×10^{-4}	6.753×10^{-1}	7.946×10^{-1}	$.476 \times 10^{-3}$	$.354 \times 10^{-6}$	7.904×10^{-1}	1.18643×10^1	$.332 \times 10^1$
2.618×10^{-4}	6.7116×10^{-1}	7.466×10^{-1}	$.443 \times 10^{-3}$	$.2742 \times 10^{-6}$	8.2376×10^{-1}	1.2588×10^1	$.26426 \times 10^1$
2.447×10^{-4}	6.675×10^{-1}	7.065×10^{-1}	$.408 \times 10^{-3}$	$.2179 \times 10^{-6}$	8.54364×10^{-1}	1.32456×10^1	$.2465 \times 10^1$
2.348×10^{-4}	6.6433×10^{-1}	6.721×10^{-1}	$.387 \times 10^{-3}$	$.176 \times 10^{-6}$	8.84129×10^{-1}	1.38255×10^1	$.21647 \times 10^1$

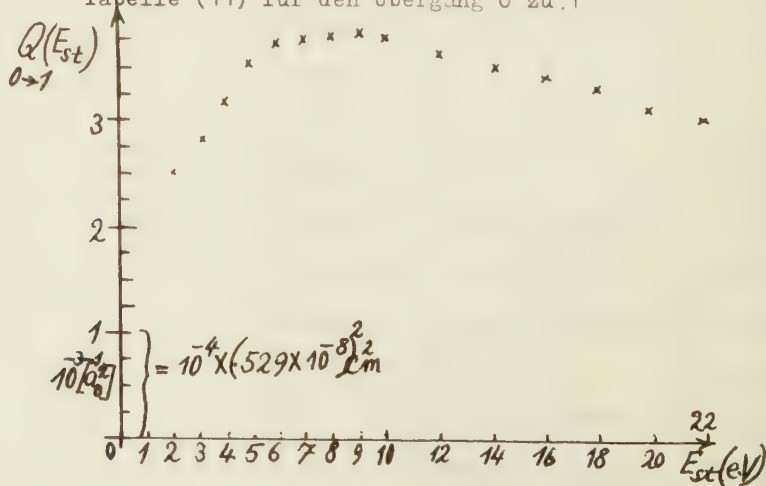
$.53973 \times 10^{-7}$	1.12×10^{-2}	2.2615×10^{-2}	$.440 \times 10^{-3}$				
$.146 \times 10^{-6}$	7.8835×10^{-1}	1.1916×10^{-1}	$.8638 \times 10^{-3}$				
$.423 \times 10^{-6}$	6.31633×10^{-1}	8.07227×10^{-2}	$.8148 \times 10^{-3}$				
$.4996 \times 10^{-6}$	5.47814×10^{-1}	6.10249×10^{-2}	$.68954 \times 10^{-3}$				
$.53166 \times 10^{-6}$	4.86842×10^{-1}	4.90523×10^{-2}	$.57668 \times 10^{-3}$				
$.541 \times 10^{-6}$	4.1211×10^{-1}	4.1×10^{-2}	$.481826 \times 10^{-3}$				
$.5373 \times 10^{-6}$	4.745×10^{-1}	3.52275×10^{-2}	$.4355 \times 10^{-3}$				
$.5287 \times 10^{-6}$	3.75226×10^{-1}	3.03761×10^{-2}	$.350624 \times 10^{-3}$				
$.5161 \times 10^{-6}$	3.56974×10^{-1}	2.74814×10^{-2}	$.304258 \times 10^{-3}$				
$.5020 \times 10^{-6}$	3.37222×10^{-1}	2.47592×10^{-2}	$.26667 \times 10^{-3}$				
$.4735 \times 10^{-6}$	3.06878×10^{-1}	2.06652×10^{-2}	$.210258 \times 10^{-3}$				
$.44692 \times 10^{-6}$	2.83058×10^{-1}	1.77733×10^{-2}	$.17056 \times 10^{-3}$				
$.42359 \times 10^{-6}$	2.6396×10^{-1}	1.553×10^{-2}	$.14147 \times 10^{-3}$				
$.4039 \times 10^{-6}$	2.48212×10^{-1}	1.38129×10^{-2}	$.12 \times 10^{-3}$				
$.388 \times 10^{-6}$	2.34943×10^{-1}	1.24381×10^{-2}	$.1025 \times 10^{-3}$				
$.27662 \times 10^{-6}$	2.0257×10^{-1}	1.13122×10^{-2}	$.89144 \times 10^{-4}$				

$Q(E)$ auf nächste Seite - 603 71
 $\rightarrow 1$

Übung 0 → 1

E_{st}	w_1	w_2	w_3	$w(E_{st})$
1	$.72765 \times 10^3$	$.12630 \times 10^4$	$-.4400 \times 10^3$	$.30028 \times 10^3$
2	1.952×10^3	$.20874 \times 10^4$	$-.8038 \times 10^3$	$.252274 \times 10^3$
3	1.079×10^3	$.17937 \times 10^4$	$-.8148 \times 10^3$	$.282138 \times 10^3$
4	$.994 \times 10^3$	$.14854 \times 10^4$	$-.6895 \times 10^3$	$.319314 \times 10^3$
5	$.922 \times 10^3$	$.1233 \times 10^4$	$-.57668 \times 10^3$	$.35765 \times 10^3$
6	$.840 \times 10^3$	$.10375 \times 10^4$	$-.48183 \times 10^3$	$.36955 \times 10^3$
7	$.778 \times 10^3$	$.8872 \times 10^5$	$-.40858 \times 10^3$	$.37000 \times 10^3$
8	$.720 \times 10^3$	$.768 \times 10^5$	$-.3506 \times 10^3$	$.3770 \times 10^3$
9	$.675 \times 10^3$	$.673 \times 10^5$	$-.3043 \times 10^3$	$.380 \times 10^3$
10	$.639 \times 10^3$	$.5955 \times 10^5$	$-.2667 \times 10^3$	$.37826 \times 10^3$
12	$.573 \times 10^3$	$.4785 \times 10^5$	$-.21026 \times 10^3$	$.36753 \times 10^3$
14	$.519 \times 10^3$	$.3944 \times 10^5$	$-.17056 \times 10^3$	$.3524 \times 10^3$
16	$.476 \times 10^3$	$.332 \times 10^5$	$-.14147 \times 10^3$	$.33785 \times 10^3$
18	$.443 \times 10^3$	$.2842 \times 10^5$	$-.1200 \times 10^3$	$.32584 \times 10^3$
20	$.408 \times 10^3$	$.2466 \times 10^5$	$-.1025 \times 10^3$	$.3080 \times 10^3$
22	$.387 \times 10^3$	$.2164 \times 10^5$	$-.8904 \times 10^4$	$.3000 \times 10^3$

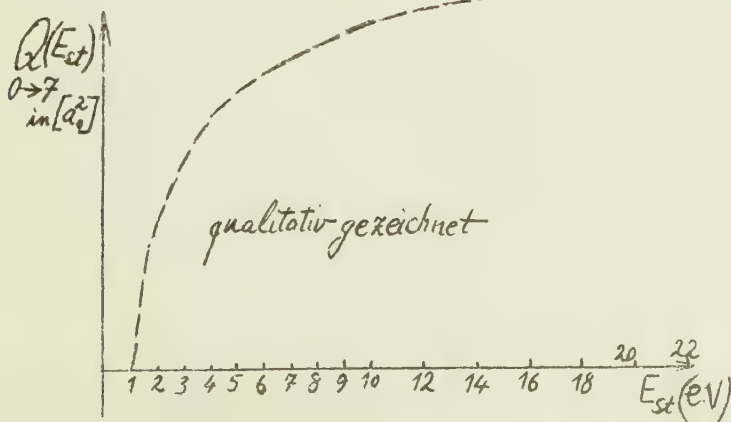
Tabelle (11) für den Übergang 0 zu 1



2. Der Übergang 0 zu 7

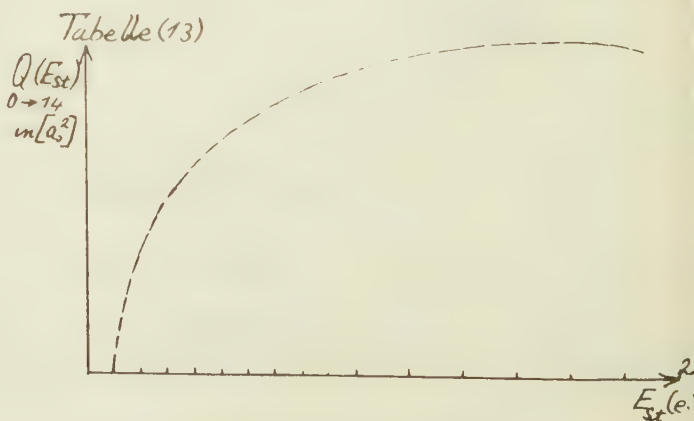
E_{st}	ψ_1	ψ_2	ψ_3	$\psi_{0-7}(E_{st})$	$\ln[a_0^2]$
1	2.0100×10^{29}	2.865×10^{30}	-5.445×10^{32}	2.000×10^{29}	
2	2.959×10^{18}	1.8400×10^{20}	-1.650×10^{18}	1.327×10^{18}	
3	2.37×10^{13}	2.910×10^{10}	1.026×10^{13}	1.3466×10^{13}	
4	7.838×10^{11}	1.190×10^{13}	4.200×10^{11}	3.050×10^{11}	
5	2.795×10^9	1.766×10^{11}	2.760×10^9	5.300×10^{11}	
6	2.662×10^8	2.774×10^{10}	3.257×10^8	5.670×10^9	
7	1.269×10^7	1.617×10^9	1.660×10^7	3.750×10^0	
8	3.912×10^7	5.370×10^9	5.260×10^7	1.294×10^7	
9	9.201×10^7	1.250×10^8	1.220×10^6	2.874×10^7	
10	1.786×10^6	2.290×10^8	2.280×10^6	4.713×10^7	
12	4.600×10^6	4.820×10^8	5.300×10^6	6.520×10^7	
14	8.658×10^6	6.900×10^8	8.090×10^0	0.370×10^7	
16	1.432×10^5	7.700×10^8	1.150×10^5	3.590×10^0	
18	1.760×10^5	7.260×10^8	1.317×10^5	4.500×10^0	
20	2.087×10^5	5.950×10^8	1.350×10^6	7.430×10^0	
22	2.440×10^5	4.270×10^8	1.252×10^5	1.190×10^5	

Tabelle (12)



3) Übergang $0 \rightarrow 14$

$E_{st} [eV]$	$Q_1 (Est)$ $0 \rightarrow 14$	$Q_2 (Est)$ $0 \rightarrow 14$	$Q_3 (Est)$ $0 \rightarrow 14$	$Q_0 (Est)$ $0 \rightarrow 14$
1				
1	4.856 $\times 10^{-101}$	1.320 $\times 10^{-123}$	-1.48 $\times 10^{-111}$	4.856 $\times 10^{-101}$
2	9.234 $\times 10^{-54}$	2.208 $\times 10^{-65}$	-7.944 $\times 10^{-58}$	9.2338 $\times 10^{-54}$
3	4.799 $\times 10^{-39}$	2.850 $\times 10^{-46}$	-1.505 $\times 10^{-41}$	4.784 $\times 10^{-39}$
4	6.941 $\times 10^{-30}$	6.705 $\times 10^{-36}$	+9.954 $\times 10^{-32}$	6.841 $\times 10^{-30}$
5	4.760 $\times 10^{-25}$	4.910 $\times 10^{-31}$	-6.174 $\times 10^{-27}$	4.7 $\times 10^{-25}$
6	2.065 $\times 10^{-22}$	8.685 $\times 10^{-26}$	-4.816 $\times 10^{-23}$	1.585 $\times 10^{-22}$
7	2.000 $\times 10^{-20}$	3.336 $\times 10^{-23}$	+5.544 $\times 10^{-21}$	2.558 $\times 10^{-20}$
8	1.722 $\times 10^{-18}$	6.315 $\times 10^{-21}$	-7.38 $\times 10^{-20}$	1.655 $\times 10^{-18}$
9	2.111 $\times 10^{-16}$	2.385 $\times 10^{-19}$	-1.708 $\times 10^{-16}$	1.005 $\times 10^{-16}$
10	1.917 $\times 10^{-14}$	1.357 $\times 10^{-17}$	-3.8 $\times 10^{-15}$	1.538 $\times 10^{-14}$
12	4.575 $\times 10^{-13}$	4.65 $\times 10^{-15}$	-3.474 $\times 10^{-13}$	1.166 $\times 10^{-13}$
14	9.368 $\times 10^{-12}$	1.23 $\times 10^{-13}$	-3.96 $\times 10^{-12}$	5.531 $\times 10^{-12}$
16	8.780 $\times 10^{-11}$	8.640 $\times 10^{-13}$	+9.0 $\times 10^{-12}$	9.166 $\times 10^{-11}$
18	3.781 $\times 10^{-10}$	2.033 $\times 10^{-12}$	+2.88 $\times 10^{-10}$	6.681 $\times 10^{-10}$
20	1.260 $\times 10^{-9}$	2.64 $\times 10^{-11}$	+1.8 $\times 10^{-9}$	3.10 $\times 10^{-9}$
22	3.700 $\times 10^{-9}$	1.545 $\times 10^{-10}$	-6.597 $\times 10^{-9}$	2.7425 $\times 10^{-9}$

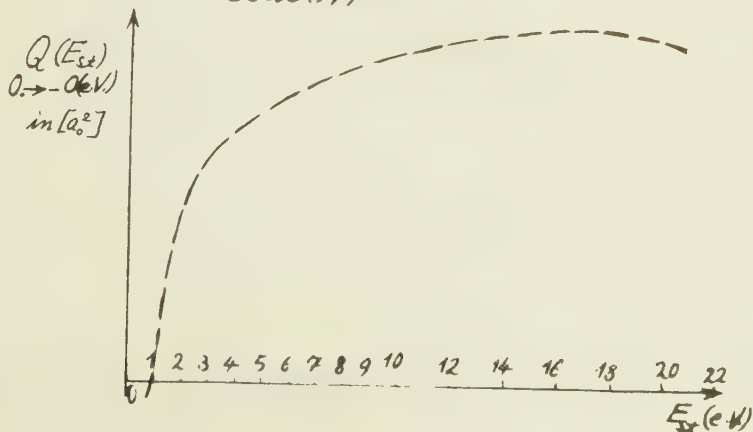


Übergang $E_0 \rightarrow E = \frac{1}{825} \text{ eV}$

(C $\rightarrow$ Diss. bei Mole ($\sim$ Diss))

$Q_1(E_{\text{ext}})$ 0 $\rightarrow$ Diss.	$Q_2(E_{\text{ext}})$ 0 $\rightarrow$ Diss.	$Q_3(E_{\text{ext}})$ 0 $\rightarrow$ Diss.	$Q(E_{\text{ext}})$ in $[a_0^2]$ 0 $\rightarrow E_{\text{ext}} = -1/825$
7.125 $\times 10^{-11}$	3.89 $\times 10^{-13}$	-2.576×10^{-123}	7.125 $\times 10^{-11}$
1.243 $\times 10^{-61}$	3.90 $\times 10^{-73}$	-2.529×10^{-66}	1.243 $\times 10^{-61}$
1.755 $\times 10^{-42}$	2.818 $\times 10^{-52}$	-4.830×10^{-46}	1.755 $\times 10^{-42}$
1.427 $\times 10^{-34}$	3.168 $\times 10^{-42}$	-7.408×10^{-37}	1.434 $\times 10^{-34}$
7.860 $\times 10^{-27}$	3.90 $\times 10^{-33}$	-2.956×10^{-29}	7.89 $\times 10^{-27}$
4.064 $\times 10^{-24}$	1.10 $\times 10^{-30}$	-1.015×10^{-26}	4.071 $\times 10^{-24}$
8.740 $\times 10^{-22}$	2.145 $\times 10^{-25}$	-1.902×10^{-22}	6.838 $\times 10^{-22}$
6.600 $\times 10^{-21}$	8.32 $\times 10^{-23}$	-1.159×10^{-20}	6.484 $\times 10^{-21}$
4.38 $\times 10^{-19}$	2.379 $\times 10^{-22}$	-4.177×10^{-19}	2.03 $\times 10^{-20}$
1.467 $\times 10^{-17}$	1.755 $\times 10^{-21}$	-1.665×10^{-18}	1.3007 $\times 10^{-17}$
1.012 $\times 10^{-14}$	5.09 $\times 10^{-17}$	-1.142×10^{-14}	2.49 $\times 10^{-16}$
5.072 $\times 10^{-13}$	3.81 $\times 10^{-15}$	-6.003×10^{-13}	9.002 $\times 10^{-14}$
7.986 $\times 10^{-12}$	3.168 $\times 10^{-14}$	-7.21×10^{-12}	8.077 $\times 10^{-13}$
6.593 $\times 10^{-11}$	9.408 $\times 10^{-14}$	-2.673×10^{-11}	3.9264 $\times 10^{-11}$
3.528 $\times 10^{-10}$	5.785 $\times 10^{-14}$	$+4.416 \times 10^{-11}$	3.9286 $\times 10^{-10}$
1.536 $\times 10^{-10}$	6.011 $\times 10^{-12}$	$+8.211 \times 10^{-12}$	1.6782 $\times 10^{-10}$

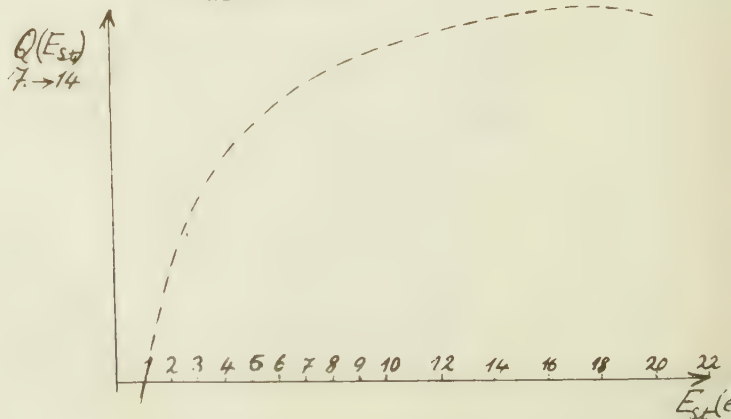
Tabelle (14)



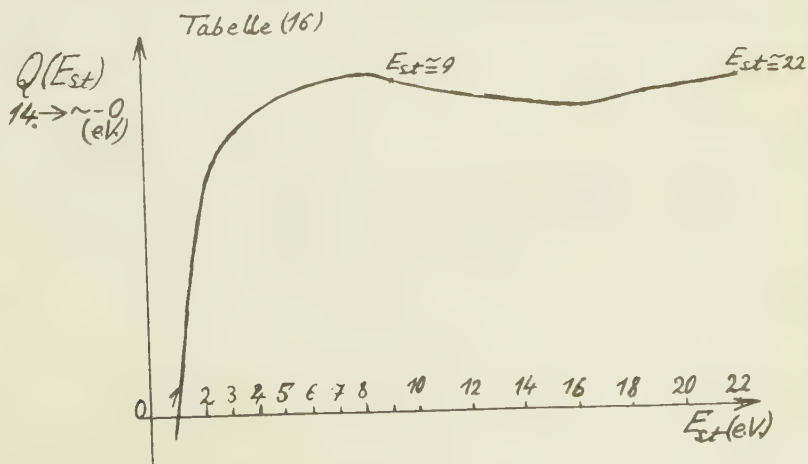
Übergang $E_7 \rightarrow E_{14}$

$E_{\text{st}} [eV]$	$Q(E_{\text{st}})$ $7 \rightarrow 14$	$Q_2(E_{\text{st}})$ $7 \rightarrow 14$	$Q_3(E_{\text{st}})$ $7 \rightarrow 14$	$Q(E_{\text{st}}) \text{ in } [a^2]$ $7 \rightarrow 14$
1	5.30 $\times 10^{-40}$	6.242 $\times 10^{-87}$	-8.937 $\times 10^{-78}$	5.30 $\times 10^{-40}$
2	6.1808 $\times 10^{-37}$	6.604 $\times 10^{-46}$	4.3533 $\times 10^{-40}$	6.182 $\times 10^{-37}$
3	3.684 $\times 10^{-26}$	5.492 $\times 10^{-32}$	-2.147 $\times 10^{-28}$	3.6626 $\times 10^{-26}$
4	3.218 $\times 10^{-21}$	1.836 $\times 10^{-25}$	+1.17 $\times 10^{-22}$	3.335 $\times 10^{-21}$
5	2.188 $\times 10^{-16}$	9.216 $\times 10^{-21}$	-8.8889 $\times 10^{-18}$	2.0991 $\times 10^{-16}$
6	9.013 $\times 10^{-14}$	8.424 $\times 10^{-18}$	-4.652 $\times 10^{-15}$	8.5488 $\times 10^{-14}$
7	5.725 $\times 10^{-12}$	3.176 $\times 10^{-16}$	-1.9729 $\times 10^{-13}$	5.528 $\times 10^{-12}$
8	1.0155 $\times 10^{-10}$	5.04 $\times 10^{-15}$	-3.1193 $\times 10^{-13}$	1.0124 $\times 10^{-10}$
9	9.216 $\times 10^{-9}$	9.5740 $\times 10^{-14}$	+3.722 $\times 10^{-11}$	8.59 $\times 10^{-9}$
10	4.741 $\times 10^{-8}$	2.772 $\times 10^{-12}$	+4.238 $\times 10^{-10}$	9.007 $\times 10^{-8}$
12	4.085 $\times 10^{-8}$	1.483 $\times 10^{-10}$	+7.918 $\times 10^{-9}$	4.891 $\times 10^{-8}$
14	8.807 $\times 10^{-7}$	1.487 $\times 10^{-9}$	+3.4705 $\times 10^{-8}$	1.2426 $\times 10^{-7}$
16	-1.90 $\times 10^{-6}$	5.752 $\times 10^{-8}$	+3.1384 $\times 10^{-7}$	1.5286 $\times 10^{-6}$
18	-1.1011 $\times 10^{-7}$	1.072 $\times 10^{-8}$	-1.3838 $\times 10^{-7}$	1.22876 $\times 10^{-6}$
20	-5.5 $\times 10^{-7}$	9.00 $\times 10^{-9}$	-4.722 $\times 10^{-7}$	1.0132 $\times 10^{-6}$
22	1.48 $\times 10^{-7}$	6.264 $\times 10^{-10}$	-2.6218 $\times 10^{-7}$	1.1355 $\times 10^{-7}$

Tabelle (15)



Übergang [eV]	$Q_1(E_{st})$ $14 \rightarrow \sim \text{Diss}$	$E_{14} \rightarrow E_m \approx -0 \text{ [eV]}$ $Q_2(E_{st})$ $14 \rightarrow \sim \text{Diss}$	$E_m = -\frac{1}{625} \text{ eV}$ $Q_3(E_{st})$ $14 \rightarrow \sim \text{Diss}$	$Q(E_{st}) \text{ in } [\text{a}^2]$ $14 \rightarrow \sim \text{Diss}$
1.9056	$\times 10^{-9}$	8.58 $\times 10^{-13}$	3.158 $\times 10^{-10}$	2.2226 $\times 10^{-9}$
3.4356	$\times 10^{-4}$	1.099 $\times 10^{-6}$	1.8986 $\times 10^{-4}$	5.3452 $\times 10^{-4}$
1.534	10^{-2}	3.442 10^{-5}	7.66 $\times 10^{-3}$	2.3033 10^{-2}
9.1855	10^{-2}	6.861 10^{-5}	2.737 10^{-2}	1.1926 10^{-1}
2.638	10^{-1}	1.527 10^{-5}	2.2 10^{-2}	2.8581 10^{-1}
4.654	10^{-1}	3.719 10^{-5}	4.68 10^{-2}	4.18637 10^{-1}
6.971	10^{-1}	3.666 10^{-4}	-1.832 10^{-1}	5.1427 10^{-1}
9.0707	10^{-1}	10.987 10^{-4}	-3.682 10^{-1}	5.40 10^{-1}
1.0876	10^0	2.194 10^{-3}	-5.788 10^{-1}	5.11 10^{-1}
1.3684	10^0	3.547 10^{-3}	-7.96 10^{-1}	5.76 10^{-1}
1.4763	10^0	6.5845 10^{-3}	-1.20 10^0	2.829 10^{-1}
7.6226	10^0	9.542 10^{-3}	-1.526 10^0	1.06 10^{-1}
1.6741	10^0	1.210 10^{-2}	-1.7698 10^0	938 10^{-1}
1.6653	10^0	1.417 10^{-2}	-1.94 10^0	2.6 10^{-1}
1.586	10^0	1.579 10^{-2}	-2.053 10^0	4.48 10^{-1}
1.5011	10^0	1.69 10^{-2}	-2.12 10^0	5.12 10^{-1}



3. Diskussion der Ergebnisse

Die wichtigen Punkte, die man bei den Ergebnissen der φ 's in Betrachtung nehmen muß sind:

- 1) Wie der Streuquerschnitt φ von der Stoßenergie E_{st} abhängt.
- 2) Was für Rolle auf die Ergebnisse jeder Potentialtopf für sich allein spielt.
- 3) Wie sich die Ergebnisse für die verschiedenen Übergänge voneinander unterscheiden.
- 4) Wie der Termabstand $E_m - E_n$ in Allgemeine mit der Anregungswahrscheinlichkeit verhält.

Um diese wichtigen Punkte zu erfüllen, haben wir die Tabellen von (11) bis (16) für die verschiedenen Übergänge, um Punkt 3 zu erfüllen; für verschiedene E_{st} um Punkt 1 zu erfüllen; und für jeden Potentialtopf wurde die φ 's allein gerechnet, um den Punkt 2 zu erfüllen. Um den Punkt 4 zu erfüllen, kann man das Verhalten aus den verschiedenen Tabellen deutlich erfahren; z.B. für den Termabstand $E_7 - E_0$ und der Termabstand $E_{14} - E_0$, wo wir aus den Tabellen für diese beiden Übergänge ersenen, daß bei Vergrößerung des Termabstandes die streuquerschnitte (bzw. Anregungswahrscheinlichkeit) abnimmt.

Außerdem wurden die Kurven (φ als Funktion von E_{st}) qualitativ für einen allgemeinen Überblick gezeichnet.

2. Wirkungsquerschnitte bei sehr kleinen Stoßenergien

Unser Ziel mit diesem Paragraph ist zu vergleichen unsere Berechnungen bzw. Berechnungsmethode mit den folgenden Methoden: quasiklassische Methode, m.w.n. Methode und die quantenmechanischen Berechnung und zwar als Beispiel für den Übergang $0 \rightarrow 1$, für die Stoßenergie $E_{st} = 1/2 \text{ e.V.}$. Außerdem, aus dieser Vergleichung, können wir einen guten Einblick über unsere allgemeine Berechnungsmethode für den Bereich, wo E_{st} ab 1 e.V. ist.

Die Formel für ψ_1 , ψ_2 und ψ_3 gelten grob für den Energiebereich, wo $E_{st} < 1 \text{ e.V.}$, deshalb müssen wir die notwendige Änderung in $a_1(E_{st}, \omega_{mn})$, $a_2(E_{st}, \omega_{mn})$, $a_3(E_{st}, \omega_{mn})$ und $u(\sqrt{-1}, \omega_{mn}) = u(\omega_{mn}, E_{st})$ durchführen, um die Formel (92)₂, (93)₁ und (94)₁ für ψ_1 , ψ_2 und ψ_3 für diesen Energiebereich zu gelten.

Wobei

$$a_1 = 240.25 \omega_{mn} \sqrt{E_{st}} \quad ,$$

$$a_2 = .12 + 300.33 \omega_{mn} \sqrt{E_{st}} \quad ,$$

$$a_3 = .56 + 270.3 \omega_{mn} \sqrt{E_{st}} \quad ; \quad u = 100.05 \omega_{mn} \sqrt{E_{st}} \quad \text{bzw.} \quad u \stackrel{\text{Def.}}{\underset{u. (84)_1}{=}} \frac{u(82)_2}{\omega_{mn}} \omega_{mn} \sqrt{-1}$$

Nun berechnen wir $a_1(E_{st} < 1 \text{ e.V.}) \equiv a_{1kl}$:

Nach Formel (85) haben wir

$$\sqrt{+1} = .93(1+r_0)/v \rightarrow 2\sqrt{+1} \omega_{mn}/v = 1.86 \omega_{mn}/v = 240.25 \omega_{mn} \sqrt{E_{st}} \stackrel{(92)_1}{=} a_1 \quad ,$$

$$\text{und mit Formel (44)}_2: \rightarrow a_1 = f(\omega_{mn}, r_0) \beta^{-1/2} = f(\omega_{mn}, r_0) \left((6v^2/\sqrt{r_0}) \right)^{-1/2} = F_1(\omega_{mn}, r_0) / \sqrt{6} v \quad (96)$$

Für unseren spez. Fall haben wir nach der Beziehung (44)₃

$$\stackrel{\beta_{2 \text{ gem.}}}{=} .357 v^{-2} r_0^{-1/2}$$

Also analog (96) erhalten wir:

$$a_{1kl} = F_1(\omega_{mn}, r_0) / (\sqrt{.357} v)$$

$$\rightarrow a_{1kl}/a_1 = \sqrt{.357} \quad \text{od.} \rightarrow a_{1kl} = 1.296 a_1 = (1 + 0.296) a_1 \quad \dots (97)_1$$

Wir nennen den Faktor 1.296 als, Vergrößerungsfaktor.

Bei a_{2kl} trägt noch ein anderer -zum ersten Faktor- entgegengesetzter Faktor bei, der zu beachten ist: Formel (83)₁ nämlich $\sqrt{+2} \approx 1.25\sqrt{+1}$, wird (für nicht große Werte von B) für groß r_0 also für sehr kleine Werte von E_{st} wie folgt geschrieben (Tab. 5):

$$\sqrt{+2} \approx \sqrt{+1}$$

d.h. wir müssen von $a_2 - 0.12 = 300.33 \frac{\omega_{mn}}{\sqrt{E_{st}}}$ den Betrag $60/E_{st}^{1/2}$ bzw. $(a_2 - 0.12)/5$ subtrahieren. Wir erhalten also durch diesen Verkleinerungsfaktor:

$$a_2 = 0.12 + (a_2 - 0.12)(0.8)$$

und analog für $a_3 = 0.56 + 270.3 \frac{\omega_{mn}}{E_{st}^{1/2}}$, erhalten wir:

$$a_3 = 0.56 + (a_3 - 0.56)(8/9).$$

Zusammen mit dem ersten Faktor werden nun a_{2kl} und a_{3kl} wie folgt:

$$\left[\begin{array}{l} a_{2kl} = 0.12 + (a_2 - 0.12) \times 0.8 \times 1.296 = .12 + 1.0368(a_2 - .12) \approx a_2 \\ a_{3kl} = 0.56 + (a_3 - 0.56) \times .88 \times 1.296 = .56 + 1.1405(a_3 - .56) \end{array} \right] \quad (97)_{2,3}$$

Für u spielen zwei Faktoren auch entgegengesetzte ungleiche Rollen:

1. nach (84)₂ wo $\sqrt{-1} = (2/3)\sqrt{-1}$,
erhalten wir:

$$u_{kl}^{(1)} = 2u/3$$

$$2. u_{kl}^{(2)} = 1.296u \rightsquigarrow$$

$$\rightsquigarrow u_{kl} = 1.296(2u/3) = 0.8653u \quad \dots\dots\dots (98)$$

Nun setzen wir anstelle von a_1, a_2, a_3 , und u in den Gl.en (92)₂, (93)₁ und (94)₁ für Q_1, Q_2 und Q_3 die neue

$a_{1kl}, a_{2kl}, a_{3kl}$ und u_{kl} ein, so erhalten wir für sehr kleine Stoßenergien folgende neue Q 's:

$$Q_{1kl} = K_{mn1} \times e^{-.296a_1(\sqrt{\alpha_0-1}+1)} \times \frac{1}{1.296} \left[\frac{L_{kl}}{mn1} + \frac{M_{kl}}{mn1} \left(\frac{1}{1.296a_1 + \sqrt{\alpha_0-1}} \right) + 865 \sin^2(8653u) (\alpha_0-1 + 1.543\sqrt{\alpha_0-1}/a_1 + 1.19/a_1^2) \right] - (99)_1$$

$$Q_{2kl} = K_{mn2} \cos^2(1.98u) e^{.2kl\sqrt{\alpha_0-1}} \left(\alpha_0-1 + 2\sqrt{\alpha_0-1}/a_{2kl} + 2/a_{2kl}^2 \right) \times \exp(-.0368(a_2-.12)(\sqrt{\alpha_0-1}+1)) \quad \dots (94)_2$$

$$Q_{3kl} = K_{mn3} \exp\{-.1405(a_3-.56)(\sqrt{\alpha_0-1}+1)\} \left\{ \frac{L_{kl}}{mn3} \left(\frac{\alpha_0-1}{a_{3kl}} + 2\sqrt{\alpha_0-1}/a_{3kl}^2 + \frac{2}{a_{3kl}^3} \right) + \frac{M_{kl}}{mn3} \left(\frac{\alpha_0-1}{a_{3kl}} + 3(\alpha_0-1)/a_{3kl}^2 + 6\sqrt{\alpha_0-1}/a_{3kl}^3 + 6/a_{3kl}^4 \right) \right\} - (99)_3$$

mit K_{mn1} , L_{kl} , M_{kl} aus (92)₃, (mit Berücksichtigung der erforderlichen Änderung von a_1 und u) und mit, K_{mn2} aus (93)₁, K_{mn3} aus (94)₂ zu kriegen.

Wollen wir jetzt $Q_{n \rightarrow m}(E_{st})$ für (z.B. den Fall:

$n \rightarrow m = 0 \rightarrow 1$, $E_{st} = (1/2)$ e.V. berechnen, so müssen wir zunächst die a 's und u für 0 zu 1, $E_{st} = (1/2)$ e.V. bestimmen und dann die a_{kl} 's und u_{kl} nach den Formeln (97)_{1,2,3} und (98) rechnen:

$$a_{0 \rightarrow 1}^{kl} (1/2) = 1.296 \times 0.707 = 0.91627$$

$$a_{0 \rightarrow 1}^{2kl} (1/2) = 0.12 + 0.9124 = 1.0324 \approx a_2$$

$$a_{0 \rightarrow 1}^{3kl} (1/2) = 0.56 + 0.901 = 1.461$$

$$u_{0 \rightarrow 1}^{kl} (1/2) = 0.849 \times 0.208_{rad.} = 0.849 \times 16.944^\circ = 14.661^\circ$$

$$\sin^2(u_{0 \rightarrow 1}^{kl}) = (0.2532)^2 = 0.06411, \quad \sin u_{0 \rightarrow 1}^{kl} \cos u_{0 \rightarrow 1}^{kl} = 0.245$$

$$\cos^2(u_{0 \rightarrow 1}^{kl}) = (0.9674)^2 = 0.9359, \quad \cos 2u_{0 \rightarrow 1}^{kl} = 0.8717$$

Gl.en (99) für $n \rightarrow m \equiv 0 \rightarrow 1$; $E_{st} = (1/2)$ e.V., liefern folgendes Ergebnis:

$$Q_{0 \rightarrow 1}^{kl} (1/2) = 1.485 \times 10^5 \times e^{-.296 \times 0.707 \times 8.21} \times (1/1.296) \times$$

$$\times (0.97 + 0.4638 \times 8.3 + 0.055455 \times 70.126)$$

$$= 1.485 \times 10^5 \times 1.205138 = \underline{1.7903 \times 10^5 a_0^2}$$

$$\begin{aligned} \psi_{2k1}^{(1/2)} &= 1.63288 \times 10^5 \times e^{-0.0368 \times 8.8 \times 8.21} \times (\cos^2(29.32^\circ) \times \\ &\quad \times e^{-7.21(50.3672 + 13.50 + 1.8176)}) \\ &= 1.63288 \times 10^5 \times 0.7666 \times 0.207 \times 10^3 \times 65.714 \\ &= \underline{0.04629 \times 10^5 a_0^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi_{3k1}^{(1/2)} &= -1.7 \times 10^9 \times e^{-1.405 \times 7.9 \times 8.21(157.0 \times 42.98 + 37.48 \times \\ &\quad \times 344.778)} \\ &= -1.7 \times 10^{9+4} \times 0.402(1.967) \\ &= \underline{-1.344 \times 10^5 a_0^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Q_{0 \rightarrow 1}(1/2) &= 10^5(1.7903 + 0.0463 - 1.344) \\ &\quad \underline{0.4986 \times 10^5 [a_0^2]} \end{aligned}$$

wir vergleichen nun unser Ergebnis ($0.4986 \times 10^5 a_0^2$) mit den Ergebnissen der schon am Anfang dieses Paragraphes erwähnten Methoden bzw. Berechnungen:

1. Quasiklassisch: $Q_{0 \rightarrow 1}(1/2) = 0.45 \times 10^5 [a_0^2]$
2. M.W.N. $Q_{0 \rightarrow 1}(1/2) = 0.52 \times 10^5 [a_0^2]$
3. Quantenmechanisch $Q_{0 \rightarrow 1}(1/2) = 0.50 \times 10^5 [a_0^2]$

IX H₂-Kontinuum und H₂-Dissoziation

1. Theoretische Einleitung

Die Formel (57) wurde für Übergänge innerhalb des diskreten Spektrum von H₂ abgeleitet.

Für Übergänge ins kontinuierliche Spektrum muß diese Formel etwas modifiziert werden. Die Zustände des kont. Sp. sind durch kontinuierlichen Index (bzw. Parameter) gekennzeichnet. Die Energie wird eine Funktion von ρ , ($E = E(\rho)$) dieses Parameters sein.

Die zugehörige Wellenfunktion ist (die auf S.(19)) $\psi_\rho(s)$. Dann tritt neben die Summe der Zustände des disk. Sp. noch das Integral des kont. Sp. über ρ auf:

$$\psi(s, t) = \sum_k c_k(t) \psi_k(s) e^{-iE_k \cdot t} + \int \rho(t) \psi_\rho(s) e^{-iE_\rho \cdot t} d\rho \quad \text{---(101)}$$

Normierung von $\psi(s) \equiv \psi_{E,lm}$ bei kont. Sp. lautet:

$$\int \psi_{E,lm}^* \psi_{E',l'm'} d\vec{s} = \delta(E - E') \cdot \delta_{lm, l'm'}$$

und in Bezug von (nur) der s-Abhängigkeit wird: $\leadsto$

$$\int_0^\infty \psi_\rho^*(s) \psi(s) ds = \delta(\rho - \rho')$$

Nun wiederholen wir die Rechenoperationen wie im Falle des disk.

Sp. (S.28, 32) und finden:

$$C_\rho^1(t \rightarrow \infty) = -i \int_{-\infty}^\infty V_{\rho n}(t) e^{-i\omega_{\rho n} t} dt \quad \text{---(102)}$$

wobei E_n (in $\omega_{\rho n} = E_\rho - E_n$) ist die ursprüngliche Energie des H₂ Mol., und:

$$V_{\rho n}(t) = \int \psi_\rho^*(s) V(s, t) \psi_n(s) ds$$

mit $V_{\rho n} \in (V_{\rho n I}, V_{\rho n II})$ ist

Ebenso erhält man die Übergangswahrscheinlichkeit im kont. Sp.

$$w_{\rho n} = |C_\rho^1(t \rightarrow \infty)|^2 \quad \text{---(103)}$$

2. Berechnung der Matrixelemente $V_{pnI}(t)$ und Übergangsamplitude

$C(t \rightarrow \infty)$: (zum ersten Potentialtopf $0 \rightarrow R_0$):

Die Matrixelemente von $V(s, t)$ im kontinuierlichen Sp. lauten - zum 1. Pot. topf $0 \rightarrow R_0 = 2.6 [R_0]$ -:

$$V_{pnI} = \int_{-R}^R \psi_p(s) V(s, t) \psi_n(s) ds$$

Nach S. 32 od. S. 19 Formel (29):-

$$\left. \begin{aligned} \psi_p &= b_{Ep} \sin(k_p s) \\ \psi_n &= b_{En} \sin(k_n s) \end{aligned} \right\} \quad \text{--- -- -- -- (105)}$$

$$V(s, t) = \frac{(26.5/E_0) / 27.21}{1 + r^2(t)} \quad \text{--- -- -- -- (106)}$$

$$\begin{aligned} V_{pnI} &= b_p b_n \frac{\alpha_0 / 27.21}{1 + r^2(t)} \int_0^{R_0} \sin(k_p s) \sin(k_n s) ds \\ &= \frac{\alpha_0 b_p b_n}{2 \times 27.21 (1 + r^2(t))} \left[\frac{\sin(R_0(k_p - k_n))}{k_p - k_n} - \frac{\sin(R_0(k_p + k_n))}{k_p + k_n} \right] \\ &\equiv \alpha_{pnI} / (1 + r^2(t)) \quad \text{--- -- -- -- (107)} \end{aligned}$$

(107) wird in (102) eingesetzt:

$$C_p^1(t \rightarrow \infty) = -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha_{pnI} e^{i(E_p - E_n)t} 4/\beta^2}{\alpha_1 + \beta_1 t^2 + t^4} dt \quad \text{--- -- -- (108)}$$

wobei $\alpha_1 = \frac{4}{\beta^2} (1 + r_0^2)$, $\beta_1 = \frac{4 r_0}{\beta}$, $E_n \equiv E_0 = \text{Ausgangsenergie}$
 $n \equiv p_0$ wo C, V, Q... kommen.

$$\rightarrow C_{pI}^1 = (C_{p \rightarrow p}^1(t \rightarrow \infty)) = -i \alpha_{pnI} \int_{-\infty}^{\infty} \chi_I(t) dt$$

Nach Gl. (70):

$$\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \chi_I(t) dt = \frac{\pi \beta^2 e^{-\omega_{pn} \sqrt{+1}}}{4 \sqrt{1 + r_0^2}} \left(\sqrt{-1} \cos \omega_{pn} \sqrt{-1} + \sqrt{+1} \sin \omega_{pn} \sqrt{-1} \right) \uparrow_{h_1}$$

$$\begin{aligned} \text{mit } \sqrt{+1} &= \sqrt{\alpha_1/2 + \beta_1/4} = \sqrt{1 + r_0^2} + r_0 / \sqrt{\beta} \\ \sqrt{-1} &= \sqrt{\alpha_1/2 - \beta_1/4} = \sqrt{1 + r_0^2} - r_0 / \sqrt{\beta} \end{aligned}$$

$$\leadsto C_{\beta I}^1(t \rightarrow \infty) = -i \alpha_{\beta \beta I} \frac{\pi e^{-\omega_{\beta \beta} \sqrt{1+\eta^2}}}{\sqrt{1+\eta^2}} h_1 \quad (\beta \equiv \eta) \quad \dots (109)$$

und in zweiter Näherung erhalten wir analog wie beim disk. Sp.:

$$\begin{aligned} \leadsto i C_{\beta I}^{(2)}(t \rightarrow \infty) &= \int_{(\beta)} V_{\beta \beta}(t) \cdot e^{i \omega_{\beta \beta} t} \cdot C_{\beta}^1(t \rightarrow \infty) d\beta \\ &= V_{\beta \beta}(t) e^{i \omega_{\beta \beta} t} \cdot C_{\beta I}^1 \end{aligned}$$

$$\leadsto C_{\beta I}^{(2)}(t \rightarrow \infty) = -\frac{e^{-2\omega_{\beta \beta} \sqrt{1+\eta^2}}}{1+\eta^2} \pi^2 h_1^2 \alpha_{\beta \beta I}^2 \ll C_{\beta I}^1(t \rightarrow \infty) \text{ weil } \omega_{\beta \beta} \sqrt{1+\eta^2} \text{ im allgemeinen groß ist.}$$

3. Berechnung von $V_{\text{gHII}}(t)$ und $U_{\text{gHII}}(t \rightarrow \infty)$: (zum zweiten Pot. topf)

Wir erhalten wieder aus der Lösung der Differenzialgleichung der Bewegung für $s > R$ (d.h. wo $V_0 = 0$) im kont. Spektrum (wo E des H_2 -Mol. größer als Null), für $l = 0$:

$$\left(-\frac{1}{2\mu R^2} \psi''(s) - E \psi(s) = 0 \right)$$

folgende Lösung: $\psi(s) = C_p \sin(k_p s + \delta_p)$ $s > R, k_p = \sqrt{2\mu E_p}$

woraus folgt:

$$\left. \begin{aligned} C_p \sin(k_p R_0) &= C_p \sin(k_p R_0 + \delta_p) \\ C_p k_p \cos(k_p R) &= C_p k_p \cos(k_p R_0 + \delta_p) \end{aligned} \right\} \quad (111)_{1,2}$$

(mit $k_p = \sqrt{2\mu(E_p + V_0)}$)

wir können nicht - außer für $E \approx 0$ - $k_p/k_p = (E/(E + V_0))^{1/2} = 0$ setzen, deshalb und für die Genauigkeit kriegen wir einfach aus den Gl.en (111)_{1,2}:

$$\delta_p = \tan^{-1} \frac{k_p}{k_p} \tan(k_p R_0) - k_p R_0 \approx -0.974 R_0 k_p \quad (112)$$

Und aus der Gl. (111)₂ kriegen wir C_p :

$$C_p = C_p \sin(k_p R_0) / \sin(k_p R_0 + \delta_p) \quad (113)$$

mit b_p aus der Normierungsbedingung (wie bei der Arbeit von Herrn Prof. Großmann) wird:

$$C_p = \sqrt{2\mu k_p / \pi (k_p^2 + 2\mu V_0 \cos^2 k_p R_0)}$$

$$\text{oder: } C_p = 34.22 \sqrt{E_p / (8.22 E_p + 22.36 V_0 \cos^2 k_p R_0)}$$

$$\left. \begin{aligned} C_p &= 11.94 \sqrt{E_p} / \sqrt{E_p + 4.777 \cos^2 k_p R_0} \\ &= \frac{11.94 E_p^{1/4} \sin(k_p R_0)}{\sqrt{E_p + 4.777 \cos^2 k_p R_0} \sin(k_p R_0 + \delta_p)} \end{aligned} \right\} \quad (114)$$

In der Formel für V_{gHII} setzen wir nun die Wellenfunktionen: $\psi_p(s), \psi_p(s)$:

$$\psi_p(s) = C_p \sin(k_p s + \delta_p), \quad \psi_p(s) = C_p \sin(k_p s + \delta_p) \text{ ein, und erhalten wir:}$$

$$\begin{aligned}
 \rho_{II}(t) &= \int_{R_0}^R C_p C_p \sin(\alpha_p s + \delta_p) \chi = \frac{88.8}{(6 + R^2(t))^2} \times \sin(\alpha_p s + \delta_p) ds \\
 &= \frac{-88.8 C_p C_p}{(6 + R^2(t))^2} \int_{R_0}^{1.71 R_0} \sin f_p(s) \sin f_p(s) ds \\
 &= \frac{-44.4 C_p C_p}{(6 + R^2(t))^2} \left[\frac{\sin(R \alpha + \delta)}{\alpha_p - \alpha_p} - \frac{\sin(R_0 \alpha + \delta)}{\alpha_p - \alpha_p} - \frac{\sin(R \alpha + \delta)}{\alpha_p + \alpha_p} + \frac{\sin(R_0 \alpha + \delta)}{\alpha_p + \alpha_p} \right] \\
 &\quad \text{mit } \alpha = \alpha_p \pm \alpha_p, \quad \delta = \delta_p \pm \delta_p = -0.74 R_0 (\alpha_p \pm \alpha_p)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \rho_{II}(t) &= \frac{-44.4 C_p C_p}{(6 + R^2(t))^2} \left[\frac{1}{\alpha_p - \alpha_p} \left\{ \sin(R \alpha_p - \alpha_p) - 0.74 R_0 (\alpha_p - \alpha_p) \right\} - \right. \\
 &\quad \left. \sin(R_0 \alpha_p - \alpha_p - 0.74 R_0 (\alpha_p - \alpha_p)) \right\} \\
 &= \frac{-44.4 C_p C_p}{(6 + R^2(t))^2 (\alpha_p - \alpha_p)} \left\{ \sin 7.36 R_0 (\alpha_p - \alpha_p) - \sin(0.26 R_0 (\alpha_p - \alpha_p)) \right\} \\
 &= \frac{-44.4 C_p C_p}{(6 + R^2(t))^2 (\alpha_p - \alpha_p)} \left\{ \sin 15.8 (\sqrt{E_p} - \sqrt{E_p}) - \sin 5.6 (\sqrt{E_p} - \sqrt{E_p}) \right\} \\
 &= \frac{-44.4 C_p C_p}{(\alpha_p + \alpha_p)} \left\{ \sin 90.5 (\sqrt{E_p} - \sqrt{E_p}) - \sin 32 (\sqrt{E_p} - \sqrt{E_p}) \right\} \chi \frac{1}{(6 + R^2(t))^2} = \frac{\alpha_{p,II} \chi}{(6 + R^2(t))^2} \quad \text{--- (15)}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 C_{p,II}^{(1)}(t \rightarrow \infty) &= -i \int_{-\infty}^{\infty} e^{i \omega_{p,II} t} \chi \frac{-\alpha_{p,II} \chi 16/\beta^4}{(\alpha_2 + \beta_2 t^2 + t^4)^2} dt \\
 &\quad \text{mit } \alpha_2 = (6 + R_0^2) \frac{4}{\beta^2}, \quad \beta_2 = \frac{4 R_0}{\beta}
 \end{aligned}$$

nach Formel (53) erhalten wir endlich:

$$\chi \rightarrow \infty = -\frac{\alpha_{p,II} \pi \omega_{p,II} \chi \sqrt{1 + R_0^2}}{52.8 \beta} \underbrace{\cos(2 \omega_{p,II} \sqrt{-1})}_{\chi_{II}} e^{\frac{-\omega_{p,II} \sqrt{+2}}{R_0}} \quad \text{--- (16)}$$

$$\text{mit } \sqrt{-1} = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sqrt{1 + R_0^2 - R_0}, \quad \sqrt{+2} = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sqrt{6 + R_0^2 + R_0}$$

Die Gesamtamplitude $C(t \rightarrow \infty)$ setzt sich aus C_{PI} und C_{PII} zusammen (Gl. (109) und (110)):

$$C(t \rightarrow \infty) = -i \alpha_{\text{PI}} \frac{\pi n_1 e^{-\frac{\omega}{\omega_0} \sqrt{1}}}{(1+r_0^2)^{1/2}} - \frac{\alpha_{\text{PII}} \pi \omega_{\text{PII}} \sqrt{1+r_0^2} e^{-\frac{\omega}{\omega_0} \sqrt{1+r_0^2}}}{52.8/\beta (6+r_0^2)} h_2,$$

$$|C(t \rightarrow \infty)|^2 = \pi^2 \left(\alpha_{\text{PI}}^2 \frac{e^{-2\frac{\omega}{\omega_0} \sqrt{1}}}{1+r_0^2} h_1^2 + \alpha_{\text{PII}}^2 \frac{\omega_{\text{PII}}^2 (1+r_0^2) e^{-2\frac{\omega}{\omega_0} \sqrt{1+r_0^2}}}{(6+r_0^2)^2 (52.8/\beta)^2} h_2^2 \right) \quad (117)$$

und nach den Formeln (83), (84), (85) für $(\sqrt{1}, \sqrt{1})$, $(\sqrt{1}, \sqrt{1})$, $(\sqrt{-2}, \sqrt{-1})$ und $(\sqrt{1}, \sqrt{1}) = 0.93(1+r)/v$ schreiben wir Gl. (117) folgendes (mit $\sqrt{-1} = 0.774(1+r_0)/v$):

$$|C(t \rightarrow \infty)|^2 = \pi^2 \alpha_{\text{PII}}^2 \exp(-1.86 \omega_{\text{PII}} (1+r_0)/v (1+r_0^2)) \left(6 \cos^2(u)/v + 8.65 \sin^2(u) \chi \right)$$

$$\chi (1+r_0)^2/v^2 + 1.44 \sin u \cos u (1+r_0)/v^2 \Big)^{1/2} + \pi^2 \alpha_{\text{PII}}^2 \frac{\omega_{\text{PII}}^2}{(6+r_0^2)^2 (1003.7 v^2)} r_0^2 (1+r_0^2) \cos^2(2u) \exp\{-2.325 \omega_{\text{PII}} (1+r_0)/v\} \quad (117)$$

$$\sigma_{\text{PI}}^{\text{el}}(E_{\text{st}}) = 2\pi \int_{\alpha_0}^{\infty} |C(t \rightarrow \infty)|^2 \frac{dr_0}{r_0} \quad \text{mit } \alpha_0 = 2\pi \alpha_0 \cdot 0.672 (\alpha_0)^{1/4} \int_{\alpha_0}^{\infty} |C(t \rightarrow \infty)|^2 \chi \quad (118)$$

Aus (117) ersieht man, dass der Wirkungsquerschnitt $\sigma_{\text{PI}}^{\text{el}}(E_{\text{st}})$ sich (bei unserem kont. Sp.) aus zwei Teile zusammensetzt, wo jeder Teil zu einem Potentialtopf allein gehört und ohne Kopplung der beiden Potentialtöpfe wie es beim disk. Sp. der Fall ist:

$$\sigma_{\text{PI}}^{\text{el}}(E_{\text{st}}) = \sigma_{\text{PI}}^{\text{el}}(E_{\text{st}}) + \sigma_{\text{PII}}^{\text{el}}(E_{\text{st}}) = 2\pi \int_{\alpha_0}^{\infty} \alpha_{\text{PI}}^2 \frac{e^{-1.86 \omega_{\text{PI}} (1+r_0)/v}}{1+r_0^2} \chi \cdot 6.72 r_0^2 (\alpha_0)^{1/4} h_1^2 (E_{\text{st}}) d\alpha_0 + \frac{1}{5.02 v^4} \alpha_{\text{PII}}^2 \int_{\alpha_0}^{\infty} \frac{6.72 (\alpha_0)^{1/4} r_0^2 (1+r_0^2) \exp\{-2.325 \omega_{\text{PII}} (1+r_0)/v\} \cos^2(2u) d\alpha_0}{(6+r_0^2)^2} \quad (118)$$

$Q_1, Q_2, Q = Q_1 + Q_2$ und $Q_{\text{Sp, diss}}$ wie in (67) u. (68) (92)₂ und (93)₁ beim disk. Sp erhalten war: -

$$S_{\text{Sp, I}} = K_{\text{Sp, I}} \left\{ L_{\text{Sp, I}} + M_{\text{Sp, I}} \left(\frac{1}{a} + \sqrt{\alpha-1} \right) + 0.65 \sin^2 \dot{u} \left(\alpha-1 + \frac{2\sqrt{\alpha-1}}{a} + \frac{2}{a^2} \right) \right\} \quad [119]$$

mit $K_{\text{Sp, I}} = 19325 \bar{a}_1^{-1} \alpha_{\text{Sp, I}}^2 \frac{-a_1(\sqrt{\alpha-1}+1)/4\sqrt{E_{\text{st}}}}{e}$; $a_1 = \frac{240.25 \text{ u.m.}}{\sqrt{E_{\text{st}}}}$

$$L_{\text{Sp, I}} = 0.6 \cos^2 \dot{u} + 0.65 \sin^2 \dot{u} + 1.44 \sin \dot{u} \cos \dot{u}$$

$$M_{\text{Sp, I}} = 1.73 \sin^2 \dot{u} + 1.44 \sin \dot{u} \cos \dot{u}$$

$$\dot{u} = \frac{10095 \text{ u.m.}}{\sqrt{E_{\text{st}}}}$$

$$a_{\text{II}} = \frac{12.300.33 \text{ u.m.}}{\sqrt{E_{\text{st}}}}$$

$$S_{\text{Sp, II}} = K_{\text{Sp, II}} L_{\text{Sp, II}} M_{\text{Sp, II}}$$

--- [119]

mit $K_{\text{Sp, II}} = 125.2921 \cdot e \times \alpha_{\text{Sp, II}}^2 \times \frac{-300.33 \text{ u.m.} \sqrt{E_{\text{st}}} - a_{\text{II}} \sqrt{\alpha-1}}{4\sqrt{E_{\text{st}}}}$

$$L_{\text{Sp, II}} = \cos^2 2 \dot{u}$$

$$M_{\text{Sp, II}} = \frac{\alpha-1}{a_{\text{II}}} + \frac{2\sqrt{\alpha-1}}{a_{\text{II}}^2} + \frac{2}{a_{\text{II}}^3}$$

$$\alpha_{\text{Sp, I}} = 8.4455 \cdot \frac{\text{Multipl. } \sqrt{E}}{\text{Sp. } \sqrt{E + 4.7 \cos(122.92 \sqrt{E} + V)}} \approx 8.3 \quad \frac{4\sqrt{E} \bar{E}_0}{\sqrt{E_0} \bar{E}_0} \quad [120]_{1,2}$$

$$S_{\text{Sp, II}} = \frac{770}{\sqrt{E_{\text{Sp}}} + \sqrt{E_0}} \left(\sin 90^\circ (\sqrt{E_{\text{Sp}}} - \sqrt{E_0}) - \sin 32^\circ (\sqrt{E_{\text{Sp}}} - \sqrt{E_0}) \right) \prod_{\text{Sp, Sp.}} \left(\frac{4\sqrt{E} \sin(122.92 \sqrt{E} + V)}{\sin 32^\circ \sqrt{E} \sqrt{E + 4.7 \cos(122.92 \sqrt{E} + V)}} \right)$$

$$\approx \frac{756}{4\sqrt{E_0} \bar{E}_0 (\sqrt{E_{\text{Sp}}} + \sqrt{E_0})} \left(\sin 90^\circ (\bar{E}_{\text{Sp}}^{1/2} - \bar{E}_0^{1/2}) - \sin 32^\circ (\bar{E}_{\text{Sp}}^{1/2} - \bar{E}_0^{1/2}) \right) \prod_{\text{Sp, Sp.}} \frac{\sin 122.92 \sqrt{E + E^0}}{\sin 32^\circ \sqrt{E}} \quad [120]_2$$

$$E_{\text{Sp}} = E + \delta \approx E$$

Für $E_{\text{Sp}} = 0$ wird $C_{\text{Sp}} \rightarrow \infty$ und da dieser Fall, praktisch, uninteressant ist - weil $E_{\text{Sp}} = 0$ bedeutet: wir haben nicht mehr n_2 -Mol.

zu dissoziieren, setzen wir $E_{\text{Sp, min}} = 0 - d_0$.

Analog setzen wir $E_{\text{Sp, min}} = 0 + d_0$ indem wir voraussetzen, daß H_2 -Mol. nicht bis zum H_2 -Nullbindungsenergie, sondern bis das

Auseinandergehen der H-Atome in geringsten anfängt, und können sie beide durch die Austauschkraft keine Möglichkeit haben, sich wieder zu vereinigen.

Q_{Diss} kriegen wir durch Integration d. $Q_{\text{Diss}}(E_{\text{st}}) = Q_1 + Q_{11}(2149_{11})$ über das H_2 -Spektrum im kontinuierlichen Teil, von $E_{\text{rel}} = 0$ bis $E_{\text{rel}} = E_0 + E_{\text{st}}$

$$\rightarrow Q_{\text{Diss}} = \int_0^{E_0 + E_{\text{st}}} Q_{\text{Diss}}(E_0) dE_0$$

$$Q_{11, \text{Diss}} = \int_0^{E_{\text{st}} + 5} (Q_{1,14}(E_0) + Q_{11,14}) dE_0 \quad \text{-----} [21]$$

$$Q_{11,14}(E_0) = \frac{19325 (\sqrt{E_{\text{st}}})^{-1}}{\frac{240(E_0 + E_0)}{27.2}} \times \frac{69}{7 \sqrt{E_0}} \times e^{\frac{-8.83}{\sqrt{E_{\text{st}}}} - ((\sqrt{\alpha_0 - 1} + 1)(E_0 + E_0))} \left\{ .777 + .577 \left(\frac{E_{\text{st}}}{8.83(E_0 + E_0)} + \sqrt{\alpha_0 - 1} \right) \right.$$

$$\left. + .577 \left(\alpha_0 - 1 + \frac{2\sqrt{\alpha_0 - 1} E_{\text{st}}}{8.83(E_0 + E_0)} + \frac{2E_{\text{st}}}{78(E_0 + E_0)^2} \right) \right\}$$

$$= \frac{451607}{E_{\text{st}}^{3/4}} e^{\frac{-4.415(\sqrt{\alpha_0 - 1} + 1) - E_0(b + 2)}{\sqrt{E_{\text{st}}}}} \times \frac{e^{-b'x}}{(E_0 + 5)} \left\{ 0.3466 + \left(\frac{\sqrt{E_{\text{st}}}}{8.83(E_0 + 5)} + \sqrt{\alpha_0 - 1} \right) + \right.$$

$$\left. \alpha_0 - 1 + \frac{\sqrt{26.5 - 1E_{\text{st}}}}{4.415(E_0 + 5)} + \frac{E_{\text{st}}}{39(E_0 + 5)^2} \right\} \quad \text{mit } b = \frac{8.83}{\sqrt{E_{\text{st}}}} (\sqrt{\alpha_0 - 1} + 1); \quad b' = b + 2$$

$$= A_1 \frac{e^{-b'x}}{E_{\text{st}}^{3/4}} \times \frac{e^{-b'x}}{x} \left\{ \frac{\alpha_0 + 3466 + \sqrt{\alpha_0 - 1}}{x} + \frac{\sqrt{E_{\text{st}}}/8.83 + \sqrt{26.5 - E_{\text{st}}}/4.415 + E_{\text{st}}}{x^2} + \frac{E_{\text{st}}}{x^3} \right\}$$

$$Q_{\text{Diss I}} = .90 \int_{0.5}^{1+E_{\text{st}}} e^{-b'x} \left(\frac{C_1}{x} + \frac{C_2}{x^2} + \frac{C_3}{x^3} \right) dx \quad \text{---} E_0 + E_0 = x \rightarrow dE_0 = dx \quad \text{-----} [21]'$$

$$= \frac{e^{-b'x}}{x} \left(\frac{b' C_3}{2} - \frac{C_3}{2x} - C_2 \right) + \ln x \left(C_1 - b' C_2 + \frac{b' C_3}{2} \right) + x \left(-b' C_1 + b' C_2 - \frac{b' C_3}{2} \right)$$

$$+ x^2 \left(\frac{b'^2 C_1}{4} - \frac{b' C_2}{4} + \frac{b' C_3}{8} \right) + x^3 \left(-\frac{b' C_1}{3 \times 3!} + \frac{b' C_2}{3 \times 3!} - \frac{b' C_3}{6 \times 3!} \right) + x^4 \left(\dots \right)$$

Wegen dieser Art von dem Integrationsergebnis wenden wir uns anderer Behandlungsmethode des Durchführen des Integration. Dafür suchen wir keine Formel, die an Stelle von $\frac{C}{x}$ bzw. $\frac{1}{x}$ gut approximiert, kommen kann:

$$\begin{aligned}
 d. \quad 1/x(E_p(E_p)) &= \frac{-\gamma x - f}{e^{\gamma x - f}} \\
 \rightarrow 1/x^2 &= \frac{-2(\gamma x - f)}{e^{\gamma x - f}} \\
 1/x^3 &= \frac{-3(\gamma x - f)}{e^{\gamma x - f}}
 \end{aligned}
 \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} d. \quad 1/x(E_p(E_p)) &= \frac{-\gamma x - f}{e^{\gamma x - f}} \\ \rightarrow 1/x^2 &= \frac{-2(\gamma x - f)}{e^{\gamma x - f}} \\ 1/x^3 &= \frac{-3(\gamma x - f)}{e^{\gamma x - f}} \end{aligned}} \right\} \quad \text{--- [22]}$$

mit $\gamma = .17$, $f = .67$

$$\begin{aligned}
 Q_{\text{Diss}}(E_p) &= .9 \int_{E_p}^{E_p + 2E_p} \left(C_1 e^{-\gamma x - .67} + C_2 e^{-\gamma x - 1.34} + C_3 e^{-\gamma x - 2} \right) dx \quad \text{--- [23]} \\
 &= \frac{.9}{\gamma} \left[C_1 e^{-\gamma x - .67} \left[\frac{-(E_p + 2E_p)}{\gamma} \right] + C_2 e^{-\gamma x - 1.34} \left[\frac{-(E_p + 2E_p)}{\gamma} \right] + C_3 e^{-\gamma x - 2} \left[\frac{-(E_p + 2E_p)}{\gamma} \right] \right] \\
 &\quad \text{--- [23]'}
 \end{aligned}$$

$$= \frac{C_1}{\gamma} \left[\frac{-(E_p + 2E_p)}{\gamma} \right] + \frac{C_2}{\gamma} \left[\frac{-(E_p + 2E_p)}{\gamma} \right] + \frac{C_3}{\gamma} \left[\frac{-(E_p + 2E_p)}{\gamma} \right]$$

mit $b_1 = \frac{8.83(\sqrt{\alpha_0 - 1} + 1) + .37}{\sqrt{E_p}} = 2 + .17$; $b_2 = b_1 + .17$; $b_3 = b_1 + .34$; C_1, C_2, C_3 sind aus [21] zu kriegen.

um Q_{Diss} zu berechnen, berechnen wir α_{Diss}^2 nach [20] und

$$\begin{aligned}
 \sin^2 1229.2 \sqrt{E_p + V_0} &\sim |E_p|^{1/2} \quad \text{im Mittel} \\
 \sin^2 32 \sqrt{E_p} &\sim |E_p|^{1/2} \quad \text{"} \\
 \sin^2 1229.2 \sqrt{E_p + V_0} / \sin^2 32 \sqrt{E_p} &= \text{konst.} \equiv \frac{1}{2} \quad (\text{und wird mit } E_p \text{ langsam}) \\
 \sin^2 1229.2 \sqrt{E_p + V_0} / \sin^2 32 \sqrt{E_p} &\approx \frac{5}{6} \quad (\text{mit } E_p \text{ wird langsam immer kleiner dann langsam wieder größer})
 \end{aligned}$$

$$\alpha_{\text{Diss}}^2 = \frac{23.94 \times 10^4 \sin^2 32 (\sqrt{E_p} - \sqrt{E_p})}{\sqrt{E_p} (E_p + E_p)^{1/2}}$$

$$Q_{II}(E_{st}) = \frac{4 \cdot 1787 \times 10^8}{E_{st}^{9/4}} \times \frac{e^{-11.037(E_0 - E_{st})(\sqrt{\alpha_0 - 1} + 1) - 12\sqrt{\alpha_0 - 1}}}{\sqrt{E_0} \sqrt{E_{st}} (E_0^{1/2} + E_{st}^{1/2})^2} \cos\left[\frac{4.2}{\sqrt{E_{st}}} (E_{st} - E_0)\right] \times M_{J_0}^{1000}$$

$$\approx \frac{961 \times 10^8}{E_{st}^{9/4}} \times e^{-11.037(E_0 + E_{st})(\sqrt{\alpha_0 - 1} + 1) - 12\sqrt{\alpha_0 - 1}} \left(\frac{4_0 - 1}{a_1} + \frac{2\sqrt{\alpha_0 - 1}}{a_{11}} + \frac{2}{a_{11}^3} \right) \dots$$

$$\text{mit } a_{11} = \frac{11.037}{\sqrt{E_{st}}} (E_0 + E_{st}) + 12$$

$$= \frac{961 \times 10^8}{E_{st}^{9/4} E_0^{1/2} \times 2} \int_{E_0}^{2E_0 + E_{st}} \frac{e^{-11.037(\sqrt{x-1} + 1)x} \left[\frac{(\alpha_0 - 1)\sqrt{E_{st}}/22.1}{x^2} + \frac{2\sqrt{\alpha_0 - 1}(E_{st}/122.1)}{x^3} + \frac{2(E_{st}^3/1349.2)}{x^4} \right] dx}{E_0}$$

$$\text{mit } x = E_0 + E_{st}$$

$1/x^2, 1/x^3$ u. $1/x^4$ und nach [B.2.2]) in dem Integranden ersetzt

$$Q_{II} = \frac{961 \times 10^8}{E_{st}^{9/4} E_0^{1/2}} \int_{E_0}^{2E_0 + E_{st}} \left[g_1 e^{-\chi} \frac{1}{h_1} + g_2 e^{-\chi} \frac{1}{h_2} + g_3 e^{-\chi} \frac{1}{h_3} \right] dx$$

$$g_1 = \frac{(\alpha_0 - 1)\sqrt{E_{st}}}{22.1} e^{-134}$$

$$g_2 = \frac{\sqrt{\alpha_0 - 1} E_{st}}{122.1} e^{-2.68}$$

$$g_3 = \frac{E_{st}^3}{1349.2} e^{-2.68}$$

$$Q_{II, \text{Diss}} = g \left\{ \frac{g_1}{h_1} \left(1 - e^{-h_1(E_{st} + E_0)} \right) + \frac{g_2}{h_2} \left(1 - e^{-h_2(E_{st} + E_0)} \right) + \frac{g_3}{h_3} \left(1 - e^{-h_3(E_{st} + E_0)} \right) \right\}$$

$$= g \left\{ \frac{g_1}{h_1} e^{-h_1 E_0} + \frac{g_2}{h_2} e^{-h_2 E_0} + \frac{g_3}{h_3} e^{-h_3 E_0} \right\}$$

$$= \frac{7.3484 \times 10^6}{h_1 (11.037\sqrt{\alpha_0 - 1} + 1 + 34) \times E_{st}^{9/4} \sqrt{E_0}} \left(\frac{2 + 12\sqrt{\alpha_0 - 1} + E_0(11.037\sqrt{\alpha_0 - 1} + 11.56)}{(h_1 + 0.17) E_{st}^{5/4} \sqrt{E_0}} \right) + \frac{7.126 \times 10^6}{(h_1 + 34) \times E_{st}^{3/4} \sqrt{E_0}} \dots$$

$$Q_{S, Diss} = Q_{I, Diss}(E_{st}) + Q_{II, Diss}(E_{st})$$

aus Gl. (123)_I für $Q_I(E_{st}, E_0$ als Parameter) und (123)_{II} für $Q_{II}(E_{st}, E_0$ als

Parameter) erhalten wir endlich:-

$$Q_{S, Diss}(E_{st}, E_0) = \frac{.46(\alpha_0 + \sqrt{\alpha_0 - 1} + .3466) e^{-b_1 E_0}}{8.83(\sqrt{\alpha_0 - 1} + 1)/\sqrt{E_{st}} + .37} + \frac{.24(\sqrt{E_{st}}/8.83 + 1.155) e^{-b_2 E_0}}{b_2 = b_1 + .17} \\ + \frac{.124(E_{st}/39) e^{-b_3 E_0}}{b_3 = b_1 + .34} + \frac{1.131 \times 10^{-6} e^{-(12\sqrt{\alpha_0 - 1} + E_0(11.037\sqrt{\alpha_0 - 1} + 11.377))}}{E_{st}^{7/4} E_0^{1/2} (11.037(\sqrt{\alpha_0 - 1} + 1) + .37)} \\ + \frac{1.06752 e^{-(h_1 + .17 E_0)}}{E_{st}^{5/4} E_0^{1/2} (h_1 + .17)} + \frac{(4885.6) e^{-(h_1 + .34 E_0)}}{E_{st}^{3/4} E_0^{1/2} (h_1 + .34)} \quad (124)$$

5. Die numerischen Ergebnisse

a) Für den Übergang $S_0 \rightarrow$ Dissoziation $14 \rightarrow$ Diss. mit $\epsilon_0 \approx .5$ e.V.
Gl. (124) nimmt dafür folgende Gestalt:

$$Q_{14, Diss.}(E_{st}) = \left\{ \frac{(\alpha_0 + \sqrt{\alpha_0 - 1} + .0406) \times .46}{\{(8.83/E_{st}^{1/2})(\sqrt{\alpha_0 - 1} + 1) + .37\} \leftarrow b_1} + \frac{.22(E_{st}^{1/2}/8.83 + 1.155) \cdot 104(E_{st}/39)}{b_1 + 17 = b_2 \quad b_1 + .34 = b_3} \right\} e^{-b_1/2} \\ + \left\{ \frac{5424(\alpha_0 - 1)}{E_{st}^{7/4}(11.037(\sqrt{\alpha_0 - 1} + 1) + .34) \leftarrow h_1} + \frac{468.22}{E_{st}^{5/4}(h_1 + .17)} + \frac{20.724/E_{st}^{5/4}(h_1 + .34)}{e^{5.039\sqrt{\alpha_0 - 1}}} \right\}$$

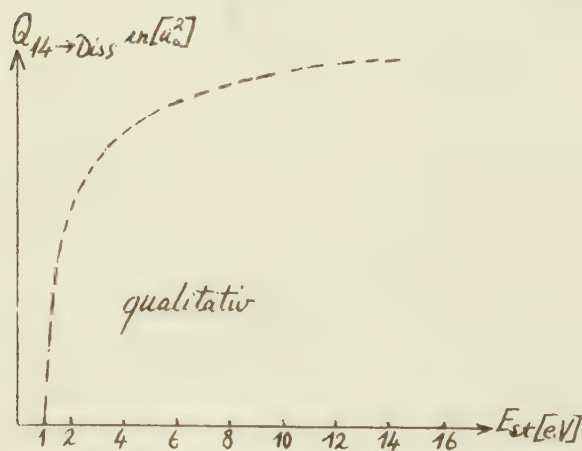
Auf die nächste Seite werden die Werte von $\omega_{14, Diss}(E_{st})$ für die Werte E_{st} 1, 2, 4, ... 16 e.V. in Tabelle (17) eingetragen.

Die Werte von ω_I und ω_{II} sind auch dabei tabellarisiert.

Übergang 14. $\rightarrow$ Diss.

E_{st}	$\psi_{I, 14-Diss.}$	$\psi_{II, 14-Diss.}$	$\psi_{14-Diss.}$
1	$.529 \times 10^{12}$	8.7078×10^{10}	8.7152×10^{10}
2	$.3496 \times 10^0$	1.0605×10^0	1.41×10^0
4	$.5523 \times 10^3$	1.1427×10^4	$.6666 \times 10^3$
6	$.1528 \times 10^2$	$.8848 \times 10^3$	$.2413 \times 10^2$
8	$.5081 \times 10^2$	$.246 \times 10^2$	$.7541 \times 10^2$
10	1.115×10^2	$.46432 \times 10^2$	1.5800×10^2
12	1.940×10^2	$.9377 \times 10^2$	2.8780×10^2
14	3.092×10^2	1.4892×10^2	4.5808×10^2
16	4.160×10^2	2.2969×10^2	6.4569×10^2
in e.V.			in $[a_0^3]$

Tabelle (17)



b)
 Für den Übergang: $7. \rightarrow \text{Diss.}$ $-E_7 = 3.535 \text{ e.V.}$
 Dafür nimmt Gl. (124) folgende Form:

$$\begin{aligned} \psi_{7, \text{Diss.}}(E_{\text{st}}) = & (.46(\alpha_0 \sqrt{\alpha_0 - 1} + .3466)/b_1 + .132(E_{\text{st}}^{1/2}/b.83 + 1.155)/b_2 \\ & + .037E_{\text{st}}/39(b_3)) e^{-3.535b_1} \\ & + (1.98(\alpha_0 - 1)/h_1 E_{\text{st}}^{1/2} + .127/h_2 + .00321E_{\text{st}}^{1/2}/h_3) \times \\ & \times 10^{12} E_{\text{st}}^{-5/4} e^{-39.13\sqrt{\alpha_0 - 1}} \end{aligned}$$

$$b_1 = 8.83(\sqrt{\alpha_0 - 1} + 1)/E_{\text{st}}^{1/2} + .37$$

$$b_2 = b_1 + .17$$

$$b_3 = b_1 + .34$$

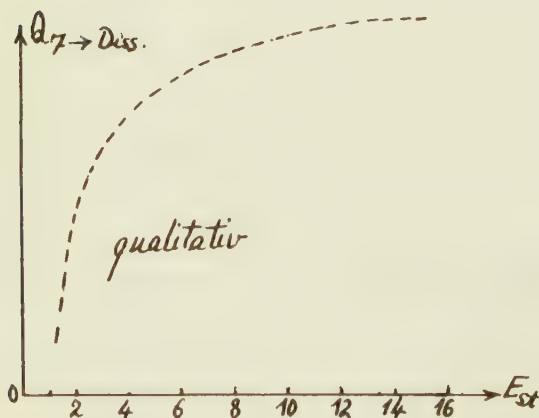
n_1, n_2 und n_3 aus Gl. (123)_{II} zu kriegen.

Übergang 7.-->Diss.

Die Gl. auf der vorigen Seite (81) für diesen Übergang wird benutzt um die folgende Tabelle (18) für $\psi_{7,Diss.}$ zu berechnen (bzw. zu bekommen).

E_{st} [eV]	$\psi_{I,7-Diss.}$	$\psi_{II,7-Diss.}$	$\psi_{7-Diss.}$ [eV]
2	$.27867 \times 10^{49}$	10^{72}	$.27867 \times 10^{49}$
4	$.12615 \times 10^{22}$	10^{52}	$.12615 \times 10^{22}$
6	$.15504 \times 10^{16}$	10^{44}	$.15504 \times 10^{16}$
8	$.3000 \times 10^{12}$	10^{39}	$.300 \times 10^{12}$
10	$.13025 \times 10^{10}$	10^{35}	$.13025 \times 10^{10}$
12	$.528 \times 10^9$	10^{31}	$.528 \times 10^9$
14	$.78845 \times 10^8$	10^{28}	$.78845 \times 10^8$
16	$.67204 \times 10^7$	10^{26}	$.67204 \times 10^7$

Tabelle (18)



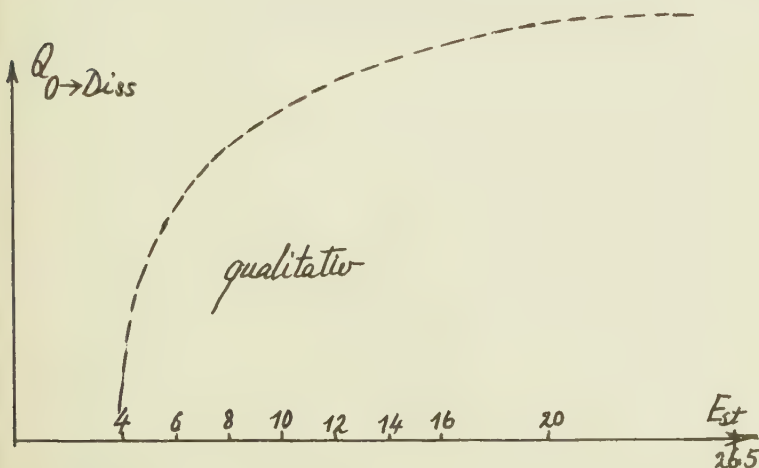
c) Für den Übergang von dem tiefsten (disk.) Energieterm ins H_2 -Kontinuum, d.h. von $E_0 = -4.72 \text{ e.V.} \rightarrow E_{\text{max}} = E_{\text{st}} + |E_0|$, wird die Gl. (124) folgendes geschrieben:

$$Q_{0 \rightarrow \text{Diss.}}(E_{\text{st}}) = \left\{ .46(\alpha + \sqrt{\alpha - 1} + .3406)/b_1 + (.01217 E_{\text{st}}^{1/2} + .124)/b_2 \right\} \times e^{-4.72/b_1}$$

$$+ \left\{ .248(\alpha - 1) E_{\text{st}}^{-1/2}/h_1 + .105/h_2 + .002155 E_{\text{st}}^{1/2}/h_3 \right\} \times e^{-52.2/\alpha - 1} \times 10^{17}$$

$E_{\text{st}} \text{ e.V.}$	$\psi_{\text{I},0\text{-Diss.}}$	$\psi_{\text{II},0\text{-Diss.}}$	$\psi_{0\text{-Diss.}} [4]$
4	$.24554 \times 10^{31}$	$\sim 10^{71}$	$.24554 \times 10^{31}$
6	$.47732 \times 10^{22}$	$\ll \psi_{\text{I}}(6)$	$.47732 \times 10^{22}$
8	$.54350 \times 10^{17}$	$\ll \psi_{\text{I}}(8)$	$.54350 \times 10^{17}$
10	$.43617 \times 10^{14}$	$\ll \psi_{\text{I}}(10)$	$.43617 \times 10^{14}$
12	$.5903 \times 10^{12}$	$\ll \psi_{\text{I}}(12)$	$.5903 \times 10^{12}$
14	$.2275 \times 10^{10}$	$\ll \psi_{\text{I}}(14)$	$.2275 \times 10^{10}$
16	$.37043 \times 10^9$	$\ll \psi_{\text{I}}(16)$	$.37043 \times 10^9$
20	$.44208 \times 10^7$	$\ll \psi_{\text{I}}(20)$	$.44208 \times 10^7$
26.5	$.2094 \times 10^5$	$\sim 10^{20}$	$.2094 \times 10^5$

Tabelle (19)



6. Diskussion der Ergebnisse

Analog zur Diskussion auf Seite (03) für das diskrete Spektrum diskutieren wir hier (für das kontinuierliche Spektrum) folgende wichtige Punkte:

- 1) Wie der Streuquerschnitt für Dissoziationen eines H_2 -Moleküls bei Stoß eines dritten H-Atoms ($\sigma_{Diss.}$) von der Stoßenergie E_{st} abhängt.
- 2) Was für Rolle auf diese Streuquerschnitte jeder der beiden Potentialtöpfe für sich allein spielt.
- 3) Wie sich die Ergebnisse für verschiedene Übergänge voneinander unterscheiden.
- 4) Wie der Dissoziationswirkungsquerschnitt von der Lage des ersten Terms (beim disk. Sp.) abhängt.

Um diese wichtigen Punkte zu erfüllen, wurden die Tabellen (17), (18) und (19) für die verschiedenen Übergänge tabellarisiert, um den Punkt 3 zu erfüllen; für verschiedene Werte E_{st} um den Punkt 1 zu erfüllen; und für jeden Potentialtopf wurden die $\sigma_{Diss.}$ gerechnet, um den Punkt 2 zu erfüllen. Um den Punkt 4 zu erfüllen, kann man das Verhalten aus den drei Tabellen deutlich erfahren; z.B. $\sigma_{14,Diss.}$ und $\sigma_{17,Diss.}$ woraus wir erkennen, daß je näher der Anfangsterm zu der Kontinuumsgerade liegt, desto leichter das Molekül dissoziiert.

Dazu wurden die Kurven ($\sigma_{Diss.}$ als Funktion von E_{st}) qualitativ gezeichnet, um einen allgemeinen Überblick zu bekommen.

Literaturverzeichnis

1. Dissociation Cross Section , November 1960, F.Uni. Berlin
Siegfried Grossmann
2. Zur Wechselwirkung Dreier Wasserstoffatome , 1964, Marburg/Lahn
Rudolf Wrzesinsky
3. Elementry Wavemechanics , 1960 , Zürich
Heitler
4. Grundlagen der Quantenmechanik , 1967, Moskau
Blochenezew
5. Problems in Quantum Mechanics, 1960
Gol'dman , Krivchenkov , Kogan , Galitskii
6. Quantum Mechanics , 1960 , Moskau
Landau und Lifschitz

تمت بحمد الله تعالى

Lebenslauf

Am 15. November 1933 wurde ich als Sohn des Lehrers Herrn Safa Aldeen in Bagdad geboren.

Das Abitur habe ich im Jahre 1952/53 in Baquba bestanden. Im Jahre 1956/57 bin ich aus der Hochschule absolviert als Lehrer für Mittelschule für Physik.

Im Jahre 1957 habe ich die militärische Ausbildungspflicht als reserve Leutnant beendet.

Im Herbst 1959 habe ich das weitere Studium in Physik, und angefangen mit der deutschen Sprache, in Österreich begonnen. Vier Semester in Österreich (Universität Graz) waren leider für mich in allgemeinen als Wiederholungen für mein Studium in Irak.

Im Jahre 1961/62 habe ich an der Freien Universität-Berlin richtig mein weiteres Studium und Ausbildung angefangen., und zwar beim Herrn Professor Ludwig.

Nachdem ich Forderungen, um die Doktorarbeit zu bekommen, erfüllt habe, kam mein Professor Vater Ludwig nach Marburg. Ich blieb danach zwei Semester ohne Professor Vater bis ich endlich entschieden habe, nach Marburg im Herbst 1964 zu meinem Professor Vater Ludwig zu kommen. Ich bekam gleich meine Doktorarbeit. Ich habe mich mit der Dissertation über -Dissoziation eines H_2 -Moleküls bei Stoß eines H-Atoms- unter der Leitung von Herrn Prof. Ludwig und Herrn Dr. Wrzesinsky beschäftigt.

Seit 17. Juni 1966 bin ich exmatrikuliert und als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für theoretische Physik (I) tätig.

